

كلية العلوم ـ جامعة دمشق



لطلاب السنة الرابعة ـ قسم الفيزياء

١٤٠٨ ـ ١٤٠٩ هـ

١٩٨٨ ـ ١٩٨٩ م

مطبعة خالد بن الوليد

مقدمة

يمثل هذا الكتاب حصيلة محاضرات في ميكانيك الكم القيتها على طلاب السنة الرابعة في قسم الفيزياء من كلية العلوم بجامعة دمشق خلال عدة سنوات .

يدرس الطالب هذا المقرر بعد أن يجتاز مقرري الفيزياء الكمومية وميكانيك الكم (١) حيث يجد فيهما عرضاً تاريخياً لتطور الأفكار الضرورية لفهم بنية الذرة ونواتها ، كما يجد المعطيات التجريبية التي يستند اليها ميكانيك الكم . لذلك لا يتعرض هذا الكتاب اطلاقاً الى التطور التاريخي لنظرية الكم .

تعد الأفكار المطروحة في هذا الكتاب استمراراً للافكار الواردة في مقرر ميكانيك الكم (١) وتكميلاً لها .

يركز هذا الكتاب بصورة رئيسة على الأفكار الفيزيائية والصيغ الرياضية لنظرية الكم التي تعالج حركة جسيم مفرد ضمن حقل خارجي ، ويظهر بشكل خاص عدم صلاحية فكرة الحركة النسبوية لجسيم مفرد . نركز الاهتمام أيضاً على نظرية التمثيل ونظرية التبعثر ونظرية الانتقالات الكمومية ، ونشرح ببعض التفصيل نظرية الجمل المكونة من بوزونات متماثلة أو فيرميونات كما نخصص بعض الفقرات لدراسة الطرائق التقريبية لمعالجة الذرة والجزيئات .

تلعب نظرية التكميم الثاني دوراً هاماً كطريقة لدراسة جمل مؤلفة من عدد كبير من الجسيمات المتماثلة ، فنتطرق في هذا الكتاب الى الافكار الاساسية لطرائق تكميم حقل الميزونات وكذلك تكميم الحقل الكهرطيسي (بدون شحنات) .

يمكن استخدام هذا الكتاب كمنطلق لدراسة التحريك الكهربائي الكمومي والفيزياء النووية وفيزياء الجسم الصلب ، ولا بد أن يكون القارىء مطلعاً على المضمون

العادي للكتب الرياضية الجامعية والميكانيك الكلاسيكي والنظرية الكهرطيسية .

ان الرموز المستخدمة مشروحة ضمن الكتاب كما أن المقادير المتجهة كتبت بحروف دابغة .

تعد مواضيع هذا الكتاب مستقلة الى حد ما ، وبهذا يمكن دراسة مجموعة من المواضيع دون الالتزام بالترتيب الوارد ، ولقد جاءت هذه المواضيع متفقة مع الخطة الموضوعة من قبل وزارة التعليم العالي لمنهج ميكانيك الكم (٢) .

دمشق في ١٩٨٧/١٢/١٥

د. بسام المغربي



الفصل الأول

نظرية التمثيل

نظريـــة التمثيل

١ ـ التمثيلات المختلفة لشعاع الحالة :

لقد اعتدنا على وصف جملة ما بالتابـع الموجي $\Psi_a(\xi, t)$ وهو تابع لجميع الاحداثيات ξ في لحظة معينة t • يشير الدليل a الى مجموعة قيـم لمقادير فيزيائية ، أو يشير الى الأعداد الكمومية المقابلة لقيم المقادير التي تعين الحالة •

يدعى وصف حالة جملة ما بواسطة تابع للاحداثيات (التابع الموجي) بالتمثيل الإحداثي ، ويحدد مربـع القيمة المطلقـة للتابـع المـوجي المستنظم ، في التمثيل الإحداثي ، احتمال الرصد في تلك الحالة المحددة بقيم الاحداثيات ξ • ويـدعى الرمز ξ الممثل لمجموعة من قيم المتحولات التي يرتبط بها التابع الموجي ، بدليل التمثيل • سنعالج في الفقرات الثلاث التالية حالات في لحظة معينة ، لذلك لن نذكر الزمن بصورة صريحة ، ولسوف نستخدم ، اضافة للرمز $\Psi_a(\xi)$ للتابع الموجي في التمثيل الاحداثي ، رموز ديراك فنكتب :

$$\Psi_a(\xi) = \langle \xi | a \rangle \qquad (1)$$

وسنوضح فيما يلي أهميـــة استخدام رمز البراكيت (ديراك) • فاستناداً الى ديراك ، يمكن التعبير عـن أيـة حالة (a) من جملة كمومية (بغض النظر عـن طريقة التمثيل) بواسطة مقدار يدعى بشعاع الكيت ويرمز لـه بالرمز $|a\rangle$ ويمكن جمع أشعة الكيت وفقاً لمبدأ التراكب ، كما يمكن ضربها بمعاملات عقديـة أو سلمية ، ونحصل على أشعة كيت جديدة • وتشكل جميع أشعة الكيت الممكنـة فراغاً له عـدد لا نهائي من الأبعاد يدعى فراغ هيلبرت •

يمكننا اسناد شعاع حالة ندعوه برا لكل شعاع من أشعة الكيت ونرمز لـه بالرمز $\langle a|$ حيث يرتبط بشعاع الكيت وفق العلاقة البسيطة $\langle a| = |a\rangle^+$ • ويمكن التعبير عن أية حالة لجملة ديناميكية بشعاع الكيت أو شعاع البرا • وتشكل جميع أشعة البرا الممكنة فراغاً ازدواجياً (Dual) مع فراغ هيلبرت لشعاع الكيت • ان لشعاع الكيت طبيعة مختلفة عن شعاع البرا فهما لا يجمعان مع بعضهما وبالتالي لا يمكن فصلهما الى جزء حقيقي صرف وآخر تخيلي صرف • فهما مقداران عقديان من نوع خاص • فاذا أثر مؤثر هرميتي $(\hat{F}^+ = \hat{F})$ من اليسار في أشعة الكيت ، حولها الى أشعة كيت أخرى ، وكذلك يحول المؤثر الهرميتي الذي يؤثر من اليمين في أشعة البرا ، الى أشعة برا أخرى أي :

$$|b\rangle = \hat{F}|a\rangle$$

$$\langle b| = (\hat{F}|a\rangle)^+ = \langle a|\hat{F}^+ = \langle a|\hat{F}$$

يقابل الاصطلاحان برا وكيت جزأي الكلمة الانكليزية براكيت (bracket) ونرمز للجداء السلمي لشعاعين من أشعة الكيت $|a\rangle$ و $|b\rangle$ بالقوس $\langle b|a\rangle$ ، اذ يتشكل من ضرب شعاع الكيت $|a\rangle$ بشعاع البرا المزدوج مع شعاع الكيت $|b\rangle$. فالجداء السلمي هو عدد عقدي نظامي يحقق العلاقة $\langle b|a\rangle = \langle a|b\rangle^*$ •

تتميز حالة الجملة الكمومية ، وفقاً لمبدأ التراكب ، باتجاه الشعاع $|a\rangle$ في فراغ هيلبرت وليس بقيمته المطلقة اذ تستنظم أشعة الحالة بشكل تكون معه قيمها المطلقة مساوية الواحد أي $\langle a|a\rangle = 1$ ، ويعين هذا الشرط شعاع الحالة مع تجاوز فرق في الطور $e^{i\varphi}$ حيث φ عدد حقيقي ، لأن للشعاعين $|a\rangle$ و $|a\rangle e^{i\varphi}$ القيمة المطلقة نفسها •

يوصف شعاع الحالة $|a\rangle$ في التمثيل الاحداثي بالتابع المـوجي (1) المرتبط بالاحداثيات ξ . ويمكننا استناداً الى تعريف الجداء السلمي $\langle b|a\rangle$ عد التابع الموجي (1) جداءً سلمياً لشعاع الحالة $|a\rangle$ بشعاع الحالة $|\xi\rangle$ من أجل جميع قيم الاحداثيات ξ التي ينظر اليها كأدلة للحالة . وبتعبير آخر ان القيـم $\langle\xi|a\rangle$ هي مساقط شعاع الحالة على قاعدة تامـة لأشعـة البـرا $|\xi\rangle$ ، ويكون التابع الموجي $\langle\xi|a\rangle$ ، مثل أي جداء سلمي ، عـدداً عقدياً عادياً .

ليس التمثيل الاحداثي ، لشعاع الحالة ، وحيداً . فهو كما في الفراغ الثلاثي المألوف ، حيث نستطيع اختيار جملة الاحداثيات ، المؤلفة من ثلاثة أشعة واحديـة متعامدة مثنى مثنى ، بالشكل الذي نريده . أي أن شعاع الحالة في فراغ هيلبرت يُعرَّف بدلالة قيم احداثياته . ونستخدم كأشعة قاعدية لفراغ هيلبرت مجموعـة تامـة من الاشعة المتعامدة أو التوابع القاعدية المقابلة لهذه الاشعة المتعامدة . ولما كانت جميـع التوابع الذاتيـة ، لأي مـؤثر هرميتي في ميكانيـك الكم ، تشكل مجموعة تامة من التوابع المتعامدة ، فاننا نستطيع استخدام أي منها كتوابع قاعديـة لفراغ هيلبرت .

تدعى مجموعة الأمثال $\langle F|a\rangle$ في النشر $|a\rangle = \sum_F |F\rangle\langle F|a\rangle$ لشعاع الحالة $|a\rangle$ بدلالة التوابع الذاتية للمؤثر $\hat{F}$ ، بالتابع الموجي للحالة a في التمثيل المقابل للمؤثر $\hat{F}$ ، أو التمثيل F . أي أننا نستطيع كتابـة شـعاع الحالة في التمثيل الطاقي (التمثيل E) أو في التمثيـل الانـدفاعي (التمثيـل P) وهكذا ... لنوضح الآن بعض هذه الأفكار بالنظر الى أمثلـة معينـة . سنختار جملتين قاعديتين من التوابع : أ ــ التوابـع الذاتيـة لمؤثر قيمـه الذاتية منفصلة ، ب ــ التوابع الذاتيـة لمؤثر قيمه الذاتية مستمرة ، ونستطيـع بسهولة تعميم النتائج فنحصل على الحالة المقابلة لمؤثر له قيم ذاتية منفصلة وأخرى مستمرة .

أ ـ التمثيل الطاقي (التمثيل E) : سنختار التوابع الذاتية لمؤثر هاميلتون، ذي القيم الذاتية المنفصلة ، كتوابع قاعدية لوصف شعاع الحالة $|a>$ ، ونرمز لهذه التوابع في التمثيل الاحداثي بالرمز

$$\varphi_{E_n}(\xi) \equiv \langle \xi | E_n \rangle. \qquad (2)$$

كما نستخدم للتوابع العقدية المرافقة لها الرمز

$$\varphi^*_{E_n}(\xi) \equiv \langle E_n | \xi \rangle \qquad (3)$$

أي لدينا

$$< E_n | \xi > = < \xi | E_n >^+ \qquad (4)$$

ونكتب شرط الاستنظام والتعامد للتوابع (2) بالشكل :

$$\int d\xi \, \varphi^*_{E_m}(\xi) \, \varphi_{E_n}(\xi) = \delta_{E_m E_n}, \qquad (5)$$

أو باستخدام رموز ديراك

$$\int d\xi \langle E_m | \xi \rangle \langle \xi | E_n \rangle \equiv \langle E_m | E_n \rangle = \delta_{E_m E_n}.$$

فاذا رغبنا في التحـول مـن التمثيـل الاحداثي $\Psi_a(\xi) = < \xi | a >$ الى التمثيل الطاقي لشعاع الحالة $\Psi_a \equiv |a>$ ، فاننا ننشـر توابـع التمثيل بدلالة التوابع القاعدية (2) فنجد :

$$\psi_a(\xi) = \sum_{E_n} \varphi_{E_n}(\xi) \, \psi_a(E_n), \qquad (6)$$

$$\langle \xi | a \rangle = \sum_{E_n} \langle \xi | E_n \rangle \langle E_n | a \rangle .$$

ان مجموعة أمثال النشر $\Psi_a(E_n) \equiv \langle E_n | a \rangle$ هي التابع المـوجي للحـالة $| a \rangle$ في التمثيل الطاقي •

تكون طاقة الجملة ، التي تأخذ قيماً منفصلة ، هي المتحول المستقل للتابـع الموجي في التمثيل الطاقي ، ويحـدد مربع القيمة المطلقة للتابع الموجي ، في التمثيل الطاقي ، احتمال وجود الجملة بطاقة تساوي قيمة الطاقة المقابلة أي :

$$W(E_n) = |\Psi_a(E_n)|^2 \equiv | \langle E_n | a \rangle |^2$$

فإذا كان التابع في التمثيل الاحداثي مستنظماً ، كان هذا التابع في التمثيـل الجديد مستنظماً أيضاً • ونستطيع اثبات هذا الأمر كما يلي :

$$\int d\xi \langle a | \xi \rangle \langle \xi | a \rangle = 1$$

ان

$$\langle a | \xi \rangle = \sum_n \langle a | E_n \rangle \langle E_n | \xi \rangle \quad \text{and} \quad \langle \xi | a \rangle = \sum_n \langle \xi | E_n \rangle \langle E_n | a \rangle .$$

وباستخدام العلاقة (5) نجد :

$$\sum_n \langle a | E_n \rangle \langle E_n | a \rangle \equiv \sum_n |\psi_a(E_n)|^2 = 1,$$

وهو الشرط الذي يجعل التوابع الموجية ، في التمثيل الطاقي ، منظمة •

وباستخدام خاصتي التعامـد والتنظيم للتوابـع القاعديـة (2) نستطيع

الحصول على التحويلات المعاكسة فنجد :

$$\psi_a(E_n) = \int d\xi\, \varphi^*_{E_n}(\xi)\, \psi_a(\xi), \tag{7}$$

أو

$$< E_n | a > = \int d\xi < E_n | \xi > < \xi | a >$$

ب ـ التمثيل الاندفاعي (التمثيل p) : ان التوابع القاعدية في التمثيل الاندفاعي هي التوابع الذاتية لمؤثر الاندفاع •

$$\varphi_p(\xi) \equiv < \xi | p > \tag{8}$$

أو

$$\int d\xi < p' | \xi > < \xi | p > = < p' | p > \equiv \delta(p'-p) \tag{9}$$

وبنشر تابع الحالة $\Psi_a(\xi)$ بدلالة مجموعة التوابع التامة (8) نجد:

$$\Psi_a(\xi) = \int dp\, \varphi_p(\xi)\, \Psi_a(p)$$

لأنّ القيم الذاتية لـ p مستمرة •

أو

$$< \xi | a > = \int dp < \xi | p > < p | a > \tag{10}$$

يحدد التابع $\Psi_p(p) \equiv < p|a >$ شعاع الحالة $|a>$ **في التمثيل الاندفاعي،** ويعطي مربع القيمة المطلقة لهذه التوابع ، كثافة الاحتمال في فراغ الاندفاع

$$\rho(p) = \frac{dW(p)}{dp} = |< p | a >|^2 \equiv |\Psi_a(p)|^2 \tag{11}$$

ويأخذ التحويل المعاكس للعلاقة (10) الشكل :

$$< p|a > = \int d\xi < p|\xi > < \xi|a >$$

وبناءً على ما تقدم فإن شعاع الحالة للجملة $|a>$ يوصف بعدة توابع موجية مرتبطة بمتحولات مختلفة أي :

$$|a> \begin{cases} <\xi|a> & \xi & \text{التمثيل} \\ <E_n|a> & E & \text{التمثيل} \\ <p|a> & p & \text{التمثيل} \\ \vdots & \vdots & \vdots \end{cases}$$

ويتم الانتقال من التابع الموجي $<m|a>$ المحدد للحالة في التمثيل m الى تمثيل آخر وليكن q وفق العلاقة العامة التالية :

$$\langle q|a\rangle = \sum_m \langle q|m\rangle \langle m|a\rangle, \qquad (12)$$

حيث $<q|m>$ هي التوابع الذاتية للمؤثر المقابل للمقدار الفيزيائي m في التمثيل q •

أما علاقة التحويل المعاكس للعلاقة (12) فهي

$$\langle m|a\rangle = \sum_q \langle m|q\rangle \langle q|a\rangle, \qquad (13)$$

حيث $<q|m>^+ = <m|q>$ هي التوابع الذاتية المقابلة للمقدار الفيزيائي q في التمثيل m • ويستبدل بالمجموع في العلاقتين (12) و (13) التكامل عندما تكون المتحولات m و q مستمرة ، (كما في (10)) •

توضح العلاقتان (12) و (13) ملاءمة استخدام رموز ديراك في وصف أشعة الحالة وخاصة عندما نود الانتقال من تمثيل الى آخر ، فنستطيع استخدام علاقات التتام للتوابع الذاتية وتكتب :

$$\sum_m |a_m|^2 \equiv \sum_m |m\rangle \langle m| = 1,$$

$$\int dp\,|a_p|^2 = \int dp\,|p\rangle\langle p| = 1 \qquad (14)$$

وهكذا نستطيع باستخدام العلاقة (14) اعادة كتابة المعادلات بشكل مختلف وتصبح العلاقة (12) من الشكل

$$\langle q|a\rangle = \int dp\,\langle q|p\rangle\langle p|a\rangle$$

وبتكرار هذه العملية نجد :

$$\langle q|a\rangle = \int dp\,\langle q|p\rangle\langle p|a\rangle =$$

$$= \int dp\,d\xi\,\langle q|p\rangle\langle p|\xi\rangle\langle \xi|a\rangle$$

لننظر الآن الى الصيغ الصريحة لبعض التوابع في التمثيلات المختلفة •

أ ــ الصيغة الصريحة للتوابع الذاتية لمؤثر الاندفاع (8) والمنظمة وفق المعادلة (9) ، في التمثيل الاحداثي هي :

$$\langle r|p\rangle = (2\pi\hbar)^{-3/2}\,e^{i(p\cdot r)/\hbar}$$

أما التحويل المعاكس فهو

$$\langle p|r\rangle = (2\pi\hbar)^{-3/2}\,e^{-i(p\cdot r)/\hbar}$$

ويمثل التابع الذاتي للاحداثي في التمثيل الاندفاعي ، وهو المرافق العقدي لتابع التحويل الأصلي •

ب ــ تكتب التوابع الذاتية لمؤثر عزم الاندفاع (أو الاندفاع الزاوي) في التمثيل الاحداثي ، بالصيغة

$$Y_{lm}(\theta,\varphi) = \langle \theta,\varphi|lm\rangle \equiv \langle \frac{r}{r}|lm\rangle \qquad (15)$$

حيث تحدد الزاويتان θ و φ اتجـاه شعاع الموضع وتكون التوابـع (15) منظمة أي :

$$\int Y^*_{lm}(\theta,\varphi)Y_{l'm'}(\theta,\varphi)\, d\Omega =$$

$$\int d\Omega < lm \mid \theta\varphi > < \theta\varphi \mid l'm' > = \quad = \delta_{ll'} \cdot \delta_{mm'} \quad (16)$$

تولد التوابع (15) تحويلاً من تمثيل الاندفاع الـزاوي الـى التمثيـل الاحداثي وتولـد التوابـع $< lm \mid \theta\varphi >$ التحويل المعاكس (من التمثيل الاحداثي الى تمثيل الاندفاع الزاوي) • فإذا عرّفنا شعاع الوحدة $n = \frac{\mathbf{r}}{r}$ الذي تحدد اتجاهه الزاويتان θ, φ نكتب عندها $< lm \mid n > = < lm \mid \theta\varphi >$ وتكون هذه التوابع منظمة وفق العلاقة :

$$\sum_{l,m} \langle n|lm\rangle \langle lm|n'\rangle = \langle n|n'\rangle = \delta(n - n').$$

واذا حددت الزاويتان θ و Φ اتجاه شعاع الاندفاع عندها تكون التوابع

$$Y_{lm}(\theta,\Phi) = Y_{lm}\left(\frac{\mathbf{p}}{p}\right) \equiv < \frac{\mathbf{p}}{p} \mid lm >$$

هي التوابع الذاتية لمؤثر الاندفاع الزاوي في التمثيل الاندفاعي •

٢ ـ التمثيلات المختلفة للمؤثرات :

المؤثر هو الجداء $\mid a > < b \mid$ حيث نضع شعاع الكيت الى يسار شعاع البرا • وكما هو الحال بالنسبة لأي شعاع ، يمكن نشر الشعاع $\mid a >$ بدلالة مجموعة تامة من الاشعة المتعامدة $\mid F_m >$ المقابلة للمؤثر $\hat{F}$ أي :

$$|a\rangle = \sum_m |F_m\rangle \langle F_m|a\rangle,$$

ويمكننا نشر أي مؤثر $\hat{A}$ بدلالة مجموعة تامة من المؤثرات $|F_m><F_n|$ فإذا كان

$$\hat{A} = \sum_{m,n} A_{mn}|F_m\rangle\langle F_n|,$$

فإننا نستطيع مستخدمين تعامد وتنظيم الاشعة $|F_m>$ أن نعين بصورة وحيدة عناصر المصفوفة في النشر أي :

$$A_{mn} = <F_m|\hat{A}|F_n>$$

ويكون نشر المؤثر الواحدي $\hat{I}$ من الشكل :

$$\hat{I} = \sum_m |F_m\rangle\langle F_m|.$$

نعبر عن المؤثرات في التمثيل الاحداثي بتوابع للاحداثيات وبمشتقات بالنسبة للاحداثيات .

فإذا أثرت هذه المؤثرات على توابع في التمثيل الاحداثي فإنها تحولها الى توابع أخرى في التمثيل نفسه . ان تأثير المؤثر $\hat{F}$ ، مثلاً ، على التابع $\Psi_a(\xi)$ يعرّف بالعلاقة

$$\Psi_b(\xi) = \hat{F}\,\Psi_a(\xi)$$

أو وفق رموز ديراك

$$<\xi|b> = \hat{F}<\xi|a> \qquad (17)$$

فإذا انتقلنا من التمثيل الاحداثي الى تمثيل آخر لشعاع الحالة ، فلا بد

بالضرورة أن نحول المؤثرات أيضاً • لنحدد الآن شكل المـؤثر $\hat{F}$ في التمثيـل الطاقي ، فنحول التوابع كما يلي :

$$\langle \xi | a \rangle = \sum_n \langle \xi | E_n \rangle \langle E_n | a \rangle,$$

$$\langle \xi | b \rangle = \sum_n \langle \xi | E_n \rangle \langle E_n | b \rangle$$

نعوض في المعادلة (17) ونضرب المعادلة الناتجـة بالمقـدار $< E_n | \xi >$ ثم نكامل على المتحول ξ فنجد بعد استخدام الشرط

$$\int d\xi < E_m | \xi > < \xi | E_n > = \delta_{mn}$$ أن

$$\langle E_m | b \rangle = \sum_n \langle E_m | \hat{F} | E_n \rangle \langle E_n | a \rangle, \quad (18)$$

حيث :

$$\langle E_m | \hat{F} | E_n \rangle \equiv \int d\xi \langle E_m | \xi \rangle F \langle \xi | E_n \rangle \equiv \int d\xi \psi^*_{E_m} \hat{F} \psi_{E_n} \equiv F_{mn}. \quad (19)$$

وبمعرفة المقدار (19) نستطيع ، مستخدمين العلاقة (18) ، التحويل من شعاع الحالة $| a >$ المعطى بالتابع $< E_n | a >$ في التمثيل الطاقي ، الـى شعاع الحالـة $| b >$ المعطى بالتابـع $< E_m | b >$ في التمثيل الطاقي • وتمثل المقادير (19) المؤثر $\hat{F}$ في التمثيل الطاقي •

تشكل الأعداد F_{mn} ، وهي أعـداد عقديـة بصورة عامة ، مصفوفـة نرمز لهـا بالرمز (F_{mn}) وتدعى المقادير $F_{mn} = < E_m | \hat{F} | E_n >$

بعناصر المصفوفة للمؤثر $\hat{F}$ في التمثيل الطاقي • فإذا كانت سويات الطاقة E_n غير منطبقة ، فإن المصفوفة (F_{mn}) تأخذ شكلاً له عدد لا نهائي من الأسطر مرقمة بالدليل m وعدد لا نهائي من الأعمدة المرقمة بالدليل n ، أما في حالة الانطباق ، فإن كل دليل (m أو n) يميز مجموعة كاملة من الأعداد الكمومية تكتب في بعض الحالات بصورة صريحة ، وتحدد حالة الجملة وتكون المصفوفة $(a'b'c' \ldots | \hat{F} | abc \ldots >) \equiv (F_{mn})$ متعددة الأبعاد •

واستناداً الى تعريف المرافق العقدي أو المؤثر الهرميتي ، نجد أن المرافق العقدي للمؤثر الهرميتي يوصف ، في التمثيل الطاقي أو في أي تمثيل قيمه منفصلة، بمصفوفة هرميتية لأن المعادلة $F_{mn} = F^*_{nm}$ محققة دوماً •

فإذا كتبنا المقدار $< E_n | a >$ ، الذي يعبر عن شعاع الحالة $| a >$ في التمثيل الطاقي ، على شكل مصفوفة ذات عمود واحد

$$(< E_n | a >) = \begin{bmatrix} < E_1 | a > \\ < E_2 | a > \\ < E_3 | a > \\ \vdots \end{bmatrix}$$

فإن المعادلة (18) تعبر عن جداء المصفوفات •

ان مؤثر هاميلتون $\hat{H}$ يشكل مصفوفة قطرية في التمثيل الطاقي

$$< E_m | \hat{H} | E_n > = E_n \delta_{mn}$$

وينتج هذا مباشرة من المعادلة (19) اذا تذكرنا أن التوابع $< \xi | E_n >$

هي التوابع الذاتية للمؤثر $\hat{H}$ أي :

$$\hat{H} < \xi | E_n > = E_n < \xi | E_n >$$

لنعين الآن شكل المؤثر $\hat{F}$ في التمثيل الاندفاعي ، ننشر التوابع (18) المكتوبة وفق التمثيل الاحداثي ، بدلالة التوابع الذاتية لمؤثر الاندفاع في التمثيل الاحداثي

$$< \xi | a > = \int dp < \xi | p > < p | a >$$

$$< \xi | b > = \int dp < \xi | p > < p | b >$$

بالتعويض في المعادلة (17) والضرب بـ $< p' | \xi >$ ثم المكاملة على المتحول ξ واستخدام شرط التعامد والتنظيم

$$\int d\xi < p' | \xi > < \xi | p > = \delta (p' - p) \qquad (20)$$

نجد

$$< p' | b > = \int dp < p' | \hat{F} | p > < p | a > \qquad (21)$$

حيث يدعى المقدار

$$< p' | F | p > = \int d\xi < p' | \xi > \hat{F} < \xi | p > \qquad (22)$$

الذي يرتبط بالدليلين p' , p ، بعناصر المصفوفة للمؤثر $\hat{F}$ المتشكلة بواسطة توابع التحويل $< \xi | p >$.

تشكل عناصر المصفوفة (22) مؤثر المقدار الفيزيائي $\hat{F}$ في التمثيل الاندفاعي ، وتؤمن المعادلة (21) طريقة التحويل لتابع ما في التمثيل الاندفاعي الى تابع آخر في التمثيل نفسه •

وبرغم كون الأدلة p, p' في العلاقة (22) ، متحولات مستمرة ، الا أنه من الملائم أن تنظر الى عناصر المصفوفة (22) على أنها مصفوفة لا نهائية الرتبة ذات عدد غير مرقم من الاسطر والاعمدة. فإذا استخدمنا هذا التفسير يمكننا اعتبار الطرف الأيمن من المعادلة (21) كجداء لمصفوفتين أدلتهما متحولات مستمرة وبالتالي ينقلب المجموع الى تكامل .

ولإيضاح ما سبق سنحسب بصورة صريحة مؤثري الاحداثيات والاندفاع في التمثيل الاندفاعي مستخدمين حركة وحيدة البعد للتبسيط . يعطى مؤثر الاندفاع في التمثيل الاحداثي بالعلاقة $\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$. ويوصف المؤثر (22) في التمثيل الاندفاعي بمصفوفة مستمرة عناصرها

$$<p'|\hat{p}|p> = \int dx <p'|x> \hat{p} <x|p> \qquad (23)$$

أن التوابع $<x|p>$ هي التوابع الذاتية لمؤثر الاندفاع أي :

$\hat{p}<x|p> = p<x|p>$. وباستخدام شرطي التعامد والتنظيم تتحول المعادلة (23) الى الشكل

$$<p'|\hat{p}|p> = p\,\delta(p'-p) \qquad (23')$$

أي أن مؤثر الاندفاع يوصف في التمثيل الاندفاعي بمصفوفة قطرية . بتعويض العلاقة (23') في (21) نجد :

$$<p|b> = p<p|a> \qquad (24)$$

وهكذا نرى أن تأثير مؤثر الاندفاع على تابع في التمثيل الاندفاعي ماهو الا جداء التابع بقيمة الاندفاع ، ونستطيع تعميم هذه النتيجة الى حالة الأبعاد الثلاثة وذلك بتبديل المقدار p بالشعاع $\mathbf{p}$.

لننظر الآن في مؤثر الاحداثيات في التمثيل الاندفاعي ، بالعودة الى العلاقة (22) نجد

$$< p' | \hat{x} | p > = \int dx < p' | x > x < x | p >$$

وباستخدام الشكل الصريح للتوابع الذاتية لمؤثر الاندفاع

$$< x | p > = (2\pi \hbar)^{-1/2} e^{ipx/\hbar}$$

نستطيع التحقق من أن ضرب هذه التوابع بـ x يعني التحويل

$$x < x | p > = -i\hbar \frac{\partial}{\partial p} < x | p >$$

وتتحول المصفوفة (25) الى الشكل :

$$< p' | x | p > = -i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \int dx < p' | x > < x | p > =$$

$$= - \frac{\partial}{\partial p} \delta (p' - p) \qquad (26)$$

أي تشكل العلاقة (26) عناصر المصفوفة المقابلة للمؤثر الاحداثي في التمثيل الاندفاعي ،

نعوض (26) في العلاقة (21) ثم نكامل بالتجزئة فنجد

$$< p' | b > = -i\hbar \int dp < p | a > \frac{\partial}{\partial p} \delta (p' - p) = i\hbar \frac{\partial}{\partial p'} < p' | a >$$

ونستطيع القول ان الاحداثي x يقابل في التمثيل الاندفاعي المؤثر التفاضلي

$$\hat{x} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \qquad (27)$$

٣ ـ تمثيل شرودينغر :

اذا كان طيف القيم الذاتية لمؤثر ما غير متغير مع الزمن ، فنستطيع استخدام مؤثرات لا يتعلق شكلها الرياضي بالزمن ، وفي مثل هذه الحالات يتحدد تغير الحالة مع الزمن بدوران شعاع الحالة • يدعى مثل هذا التمثيل للمؤثرات ولأشعة الحالة بتمثيل شرودينغر ، ويتحدد تغير الحالة مع الزمن بمعادلة شرودينغر $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi$ •

ونستطيع التعبير عن علاقة التوابع الموجية بالزمن في تمثيل شرودينغر بالتحويل الواحدي

$$\Psi(\xi, t) = \hat{S}(t)\, \Psi(\xi) \qquad (28)$$

حيث $\Psi(\xi)$ هي قيمة التابع الموجي في اللحظة $t = 0$ ، بينما يتغير المؤثر $\hat{S}(t)$ بصورة مستمرة مع الزمن ، ويكون مساوياً مؤثر الوحدة $\hat{S}(0) = 1$ في اللحظة $t = 0$ • ويجب على المؤثر $\hat{S}(t)$ أن يكون واحدياً أي يحقق العلاقة :

$$\hat{S}^{+}(t) \cdot \hat{S}(t) = 1$$

لأن ذلك يؤمن **التنظيم** الدائم أي ،

$$\langle \hat{S}\Psi | \hat{S}\Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{S}^{+} \hat{S} | \Psi \rangle = \langle \Psi | \Psi \rangle$$

ولتعيين شكل المؤثر $\hat{S}(t)$ نعوض المعادلة (28) في معادلة شرودينغر فنجد

$$\left[i\hbar \frac{\partial \hat{S}(t)}{\partial t} - \hat{H}\, \hat{S}(t) \right] \Psi(\xi) = 0$$

والتي تكتب كمعادلة للمؤثر بالشكل :

$$i\hbar \frac{\partial \hat{S}(t)}{\partial t} = \hat{H} \hat{S}(t) \qquad (29)$$

فإذا لم يرتبط $\hat{H}$ ارتباطاً صريحاً بالزمن استطعنا حل المعادلة (29) فنجد :

$$\hat{S}(t) = \exp(-i\hat{H}t/\hbar) \qquad (30)$$

ويتحدد تغير الحالة مع الزمن بالتابع الموجي

$$\Psi(\xi, t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar} \Psi(\xi) \qquad (31)$$

ولتحديد عمل المؤثر $e^{-i\hat{H}t/\hbar}$ على التابع $\Psi(\xi)$ ننشر التابع بدلالة التوابع الذاتية للمؤثر $\hat{H}$ • فإذا كان $\hat{H}\varphi_n = E_n \varphi_n$ فإن المعادلة (31) تصبح من الشكل :

$$\varphi(\xi, t) = \sum_{k=0}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)^k \frac{1}{k!} \sum_n a_n\varphi_n \quad \langle p|r\rangle = (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{-i(p\cdot r)/\hbar},$$

$$= \sum_n a_n\varphi_n \sum_k \left(-\frac{i}{\hbar}E_n t\right)^k \frac{1}{k!} = \sum_n a_n\varphi_n e^{-iE_n t/\hbar}. \qquad (32)$$

٤ ـ تمثيل هايزنبرغ :

لا يتغير التابع الموجي ، في هذا التمثيل ، مع الزمن ولكن المؤثرات المقابلة للمقادير الفيزيائية هي التي تتغير مع الزمن • ليكن $\Psi_{sch}(\xi, t)$ هو التابع الموجي في تمثيل شرودينغر ، و $\Psi_H(\xi)$ هو التابع الموجي المستقل عن الزمن في تمثيل هايزنبرغ باستخدام العلاقة (31) نستطيع الانتقال من تمثيل

شرودينغر الى تمثيل هايزنبرغ من خلال التحويل

$$\Psi_H(\xi) = \hat{S}^{-1}(t)\, \Psi_{sch}(\xi, t) \qquad (33)$$

حيث $\hat{S}(t)$ هو المؤثر (30) • لا بد عند استخدام العلاقة (33) لدى الانتقال من تمثيل شرودينغر الى تمثيل هايزنبرغ ، من تغير المؤثرات وفقاً للقاعدة :

$$\hat{F}_H(t) = \hat{S}^{-1}(t)\ \hat{F}_{sch} \hat{S}\ (t) \qquad (34)$$

فإذا كان المؤثر مستقلاً عن الزمن في تمثيل شرودينغر ، فإنه يكون مرتبطاً بالزمن في تمثيل هايزنبرغ وتعطى علاقة المؤثر بالزمن كما في العلاقة (34) بينما تكون التوابع الموجية مستقلة عن الزمن لأن $\hat{S}\ (0) = \hat{S}^{-1}(0) = 1$ وبالتالي يكون تمثيل شرودينغر مماثلاً لتمثيل هايزنبرغ في اللحظة $t = 0$ ، وكذلك يكون المؤثران متماثلين في التمثيلين عند اللحظة $t = 0$ ، $\hat{F}_H(0) = \hat{F}_{sch}(0)$ • تحدد العلاقة (34) كيفية تغير المؤثر مع الزمن في تمثيل هايزنبرغ ويعطى مقدار التغير خلال الفترة Δt بالعلاقة :

$$\hat{F}(t + \Delta t) = \hat{S}^{-1}(\Delta t)\, \hat{F}\ (t)\ \hat{S}\ (\Delta t) \qquad (35)$$

$$= \hat{F}\ (t) + \frac{1}{i\hbar} \cdot [\hat{H}, \hat{F}\ (t)]_{-} \Delta t + \dots$$

وتكون معادلة الحركة للمؤثر $\hat{F}$ في تمثيل هايزنبرغ من الشكل :

$$\frac{d\hat{F}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{F}, \hat{H}]_{-} \qquad (36)$$

٥ ـ تمثيل التفاعل :

ندرس في كثير من الأحيان جملاً مؤلفة من أجزاء متعددة تتفاعل فيما بينها، ونكتب مؤثر هاميلتون على شكل مجموع حدين

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} \qquad (37)$$

حيث $\hat{H}_0$ هو مؤثر هاميلتون عند اهمال التفاعل بين أجزاء الجملة ، و $\hat{V}$ هو مؤثر التفاعل . ونستخدم في مثل هذه الحالات تمثيل التفاعل لوصف تغير الحالة مع الزمن . ويتم الانتقال من التوابع الموجية في تمثيل شرودينغر $\Psi_{sch}(\xi, t)$ الى التوابع الموجية في تمثيل التفاعل $\Psi_{int}(\xi, t)$ بواسطة المؤثر الواحدي

$$S(t) = e^{i \hat{H}_0 t/\hbar} \qquad (38)$$

أي

$$\Psi_{int}(\xi, t) = \hat{S}(t) \Psi_{sch}(\xi, t) \qquad (39)$$

وبالتعويض في معادلة شرودينغر التالية :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_{sch}(\xi, t)}{\partial t} = (\hat{H}_0 + \hat{V}) \Psi_{sch}(\xi, t) \qquad (40)$$

قيمة التابع الموجي $\Psi_{sch}(\xi, t) = e^{-i H_0 t/\hbar} \Psi_{int}(\xi, t)$

نحصل على المعادلة التالية في تمثيل التفاعل :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_{int}(\xi, t)}{\partial t} = \hat{V}_{int} \Psi_{int}(\xi, t) \qquad (41)$$

حيث

$$\hat{V}_{int} = \hat{S}(t)\,\hat{V}\,\hat{S}^{+}(t) = e^{iH_0 t/\hbar}\,\hat{V}\,e^{-iHt/\hbar} \qquad (42)$$

وتكون التوابع الموجية وكذلك المؤثرات ، تابعة للزمن في تمثيل التفاعل ، ونعبر عن هذه التبعية بالعلاقة (42) أو بالمعادلة :

$$\frac{d\hat{F}_{int}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\,[\hat{F}_{int}, \hat{H}_0]_{-} \qquad (43)$$

٦ ـ المعادلات الكلاسيكية للحركة :

سنلخص في هذه الفقرة نظرية هاميلتون الكلاسيكية اذ نستطيع التوصل الى معادلات الحركة لجملة ذات (f) درجة من الحرية انطلاقاً من تابع لاغرانج $L(q_1, \dots, q_f, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_f, t)$ المرتبط بالاحداثيات q_i والسرع $\dot{q}_i$ والزمن t • فباستخدام التغيرات نجد :

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} L\,dt = 0 \quad ; \quad \delta q_i(t_1) = \delta q_i(t_2) = 0 \qquad (44)$$

ونتوصل الى معادلات لاغرانج

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0 \quad ; \quad i = 1, \dots, f \qquad (45)$$

فإذا عرفنا الاندفاع القانوني المرافق لـ q_i بالعلاقة $p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$ •

وعرفنا تابع هاملتيون بالعلاقة

$$H(q_1,\ldots,q_f,p_1,\ldots,p_f,t) = \sum_{i=1}^{f_1} p_i \dot{q}_i - L \qquad (46)$$

عندها تأخذ معادلات الحركة الشكل الهاميلتوني التالي :

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad ; \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \qquad i = 1, \ldots, f \qquad (47)$$

ويعطى الارتباط الزمني ، لأي تابع للاحداثيات والاندفاعات والزمن ، عند نقطة طور متحركة ، بالعلاقة :

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_{i=1}^{f} \left(\frac{\partial F}{\partial q_i}\dot{q}_i + \frac{\partial F}{\partial p_i}\dot{p}_i \right) =$$

$$= \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_{i=1}^{f} \left(\frac{\partial F}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i} \right)$$

حيث تم استخدام معادلات هاميلتون (47) .

نعرف معترضة بواسون $\{A, B\}$ لأي تابعين للاحداثيات والاندفاعات بالعلاقة :

$$\{A, B\} = \sum_{i=1}^{f} \left(\frac{\partial A}{\partial q_i}\frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial B}{\partial q_i}\frac{\partial A}{\partial p_i} \right) \qquad (48)$$

فتصبح معادلة الحركة للتابع F المرتبط بمتحولات الحركة من الشكل :

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \{F, H\} \qquad (49)$$

يمكن التوصل للصيغة الكواتنية لمعادلات الحركة باستبدال بمعترضات بواسون $\{F, H\}$ الاقواس التبادلية مقسومة على $i\hbar$ أي

$$\{A, B\} \rightarrow \frac{1}{i\hbar}[A, B]_{-} \qquad (50)$$

ومن ثم استخدام تمثيل هايزنبرغ •

٧ ـ حركة جسيم مشحون ضمن حقل كهرطيسي :

يأخذ تابع هاميلتون الكلاسيكي ، الذي يصف حركة جسيم (يتعين موضعه بالمتحول r واندفاعه بالمتحول p) ضمن حقل كهرطيسي (معين بالكمونين $A(r,t)$ و $(\Phi(r,t))$) ، الشكل :

$$H = \frac{1}{2m}\left(p - \frac{e}{c}A\right)^2 + e\Phi \qquad (51)$$

حيث e هي شحنة الجسيم و c هي سرعة الضوء ، كما تعطى شدة الحقل الكهربائي والتحريض المغناطيسي بدلالة الكمونين بالعلاقتين :

$$\bar{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \bar{A}}{\partial t} - \nabla\Phi \quad ; \quad \bar{H} = \bar{\nabla} \times \bar{A} \qquad (52)$$

وتأخذ شروط التكميم في الاحداثيات الديكارتية الصيغ :

$$[x, p_x]_{-} = [y, p_y]_{-} = [z, p_z]_{-} = i\hbar \qquad (53)$$

سنستخدم الآن معادلة هايزنبرغ (العلاقة 36) مع الهاميلتوني (51) والعلاقات (53) من أجل حساب السرعة $\frac{dr}{dt}$ والتسارع $\frac{d_2r}{dt^2}$ للجسيم المشحون ونقارنها مع تلك المحسوبة في الميكانيك الكلاسيكي •

لا بد قبل حساب الاقواس التبادلية الناتجة من التعويض في العلاقة (36) ، من اشتقاق بعض النتائج الابتدائية • يكون التابعان للموضع بصورة عامة تبادليين لأن جميع مركبات شعاع الموضع r تتبادل فيما بينها ، فباستخدام العلاقات (53) نجـد :

$$x^2 p_x - p_x x^2 = x(p_x + i\hbar) - p_x x^2 =$$

$$= (p_x x + i\hbar)x + i\hbar x - p_x x^2 = 2 i\hbar x$$

وبصورة عامة :

$$x^n p_x - p_x x^n = n i \hbar x^{n-1} \qquad (54)$$

واذا كان $f(r)$ تابعاً صريحاً للموضع نستطيع كتابة العلاقة (54) بالشكل :

$$[f(r), p_x] = f(r) p_x - p_x f(r) = i\hbar \frac{\partial}{\partial x} f(r) \qquad (55)$$

ونستطيع التوصل الى صيغة أعم من (55) وذلك باستخدام المؤثر $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ ممثلاً للاندفاع p_x • فإذا أثرنا من اليسار في العلاقـة (55) بتابـع اختياري $g(r)$ ، نجـد :

$$[f(r), p_x] g(r) = -i\hbar \left[f(r)\frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} f(r)\right] g(r) =$$

$$= g(r)\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial x} f(r)\right]$$

كما أننا نستطيع بتكرار تطبيق العلاقة (55) أن نجد :

$$f(r) p_x^2 - p_x^2 f(r) = i\hbar\left(p_x \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial x} p_x\right) =$$

$$= 2 i\hbar \frac{\partial f}{\partial x} p_x + \hbar^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \qquad (56)$$

نستطيع الآن كتابة تابع هاميلتون (51) بالاستعانة بالعلاقة (56) فنجد :

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{e}{2mc}(P \cdot A + A \cdot P) + \frac{e^2}{2mc^2}A^2 + e\Phi$$

$$= \frac{p^2}{2m} - \frac{e}{mc}A \cdot P + \frac{ie\hbar}{2mc}\nabla \cdot A + \frac{e^2}{2mc^2}A^2 + e\Phi \qquad (57)$$

ويعطى المشتق الاول لاحدى مركبات الموضع باستخدام العلاقة (36) فنجد:

$$\frac{dx}{dt} = \frac{1}{m}(P_x - \frac{e}{c}A_x) \qquad (58)$$

وهذا على وفاق مع العلاقة الكلاسيكية بين السرعة والاندفاع لجسيم مشحون ضمن حقل كهرطيسي ٠ أما مركبة التسارع فتحسب بالشكل التالي :

$$\frac{d_2x}{dt^2} = \frac{1}{m}(\frac{dP_x}{dt} - \frac{e}{c}\frac{dA_x}{dt}) =$$

$$= -\frac{1}{i\hbar m}[P_x, H]_- - \frac{e}{mc}\frac{\partial A_x}{\partial t} - \frac{e}{i\hbar mc}[A_x, H]_-$$

وبالتعويض ومتابعة العمليات الجبرية الطويلة نتوصل الى الصيغة :

$$\frac{d_2x}{dt^2} = -\frac{e}{m}(\frac{1}{c}\frac{\partial A_x}{\partial t} + \frac{\partial \Phi}{\partial x}) +$$

$$+ \frac{e}{2m^2c}[(P_y - \frac{e}{c}A_y)(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y})$$

$$+ (\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y})(P_y - \frac{e}{c}A_y)] -$$

$$- \frac{e}{2m^2c}[(P_z - \frac{e}{c}A_z)(\frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x})$$

$$+ (\frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x})(P_z - \frac{e}{c}A_z)] \qquad (59)$$

ويمكن كتابة المعادلة (59) مع معادلتين مماثلتين للمركبتين z , y في معادلة شعاعية واحدة هي :

$$m\frac{d_2r}{dt^2} = e(-\frac{1}{c}\frac{\partial A}{\partial t} - \nabla\Phi) +$$

$$+ \frac{1}{2}\frac{e}{c}[\frac{1}{m}(P - \frac{e}{c}A) \times (\nabla \times A) -$$

$$- \nabla \times A \times \frac{1}{m}(P - \frac{e}{c}A)]$$

$$m\frac{d_2r}{dt^2} = eE + \frac{1}{2}\frac{e}{c}(\frac{dr}{dt} \times H - H \times \frac{dr}{dt}) \qquad (60)$$

تتفق المعادلة (60) مع مقابلتها في الفيزياء الكلاسيكية $eE + \frac{e}{c}(V \times H)$ حيث $V = \frac{dr}{dt}$ هي سرعة الجسيم أما الحدان $V \times H$ و $-H \times V$ فهما متماثلان من وجهة نظر كلاسيكية ومختلفان في الميكانيك الكمومي اذ أن V غير تبادلي مع H ، أما في تمثيل شرودينغر فنستطيع كتابةالعلاقة (57) مع معادلة شرودينغر وتتوصل الى معادلة شرودينغر لجسيم مشحون يتحرك ضمن حقل كهرطيسي وهي :

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{dt} = (-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{ie\hbar}{mc}A \cdot \nabla +$$

$$+ \frac{ie\hbar}{2mc}\nabla \cdot A + \frac{e^2}{2mc^2}A^2 + e\Phi)\Psi$$

٨ ـ الانتقال الحدي من الميكانيك الكمومي الى الميكانيك الكلاسيكي :

لا تختلف معادلة حركة الجسيم المتحرك ضمن حقول ناعمة عن معادلة نيوتن الكلاسيكية عندما يملك هذا الجسيم اندفاعاً كبيراً • ان أبسط أسلوب لدراسة الانتقال من الميكانيك الكمومي الى الميكانيك الكلاسيكي يبدأ بكتابة التابع الموجي بالشكل :

$$\Psi (r,t) = e^{is (r,t)/\hbar} \qquad (61)$$

بتعويض الحل (61) في معادلة شرودينغر التي تصف حركة جسيم كتلة μ ضمن حقل كموني طاقته $U(r)$ نجد :

$$-\frac{\partial s}{\partial t} = \frac{\nabla s \cdot \nabla s}{2\mu} + U(r) - \frac{i\hbar}{2\mu} \nabla^2 s \qquad (62)$$

وهي معادلة تحدد التابع العقدي $S(r,t)$ •

عندما يكون الحد الأخير في الجانب الأيمن من المعادلة (62) صغيراً بالمقارنة مع باقي حدود المعادلة نستطيع اهماله ونحصل على معادلة هاميلتون ـ جاكوبي المعروفة في الميكانيك الكلاسيكي

$$-\frac{\partial S_0}{\partial t} = \frac{(\nabla S_0)^2}{2\mu} + U(r) \qquad (63)$$

وهي معادلة تفاضلية من المرتبة الأولى لتابع الفعل المعرف بدلالة تابع لاغرانج L من خلال التكامل

$$S_0(r,t) = \int_0^t L(r, \dot{r}, t')\, dt'$$

ويرتبط الاندفاع بتابع العمل وفق العلاقة

$$p = \vec{\nabla} S_0$$

نجد بمقارنة العلاقتين (62) و (63) أن الانتقال من الميكانيك الكمومي الى الميكانيك الكلاسيكي يتم بجعل $\hbar \to 0$ وهذا مبرّر فقط عندما يكون الحد الذي يحوي $\hbar$ في المعادلة (62) صغيراً بالمقارنة مع باقي حدود المعادلة .

ولتبسيط دراسة الشروط التي نستطيع معها وصف الجمل الكمومية بطريقة كلاسيكية سنعالج الحالات المستقرة حيث تكون طاقة الجملة معروفة تماماً ويكون ارتباط التابع الموجي بالزمن محدّداً بالعلاقة

$$\Psi(r, t) = \Psi(r)\, e^{-iEt/\hbar}$$

أي أننا نستطيع في هذه الحالة كتابة التابع $S(r, t)$ بالشكل

$$S(r, t) = \sigma(r) - Et \qquad (64)$$

وتأخذ المعادلة (62) الشكل :

$$\frac{(\vec{\nabla}\sigma)^2}{2\mu} + U(r) - E - \frac{i\hbar\, \nabla^2 \sigma}{2\mu} = 0 \qquad (65)$$

ويتم الانتقال من ميكانيك الكم الى الميكانيك الكلاسيكي بحذف الحد الأخير من المعادلة (65) فتصبح :

$$\frac{(\vec{\nabla}\sigma_0)^2}{2\mu} + U(r) - E = 0 \qquad (66)$$

وهي معادلة تعطي التابع σ_0 الذي يتعلق باحداثيات الجسم فقط ويرتبط

باندفاع الجسيم من خلال العلاقة :

$$\mathbf{P} = \vec{\nabla}\, \sigma_0 \qquad (67)$$

ونستطيع استخدام المعادلة (66) عوضاً عن المعادلة (67) عند تحقق الشرط

$$(\vec{\nabla}\, \sigma_0)^2 >> \hbar\, |\, \Delta\, \sigma_0\, | \qquad (68)$$

الذي يكتب بدلالة الاندفاع المعرّف بالعلاقة (67) على الشكل :

$$P^2 >> \hbar\, |\, (\vec{\nabla} \cdot \mathbf{P})\, | \qquad (69)$$

أو

$$\mathbf{P}^3 >> \mu \hbar\, |\, dU/dx\, | \qquad (80)$$

يمكن عند تحقق المتراجحة (69) تطوير طريقة تقريبية لحل مسائل ميكانيك الكم انطلاقاً من ادخال تصحيحات على الوصف الكلاسيكي • تدعى هذه الطريقة بالتقريب شبه الكلاسيكي أو تقريب (WKB) نسبة الى Wentzel - Kramers - Brillouin

٩ ـ التقريب شبه الكلاسيكي :

هي طريقة تقريبية لحل المعادلة الكمومية (65) وايجاد التابع σ (r) الذي يحدد التابع الموجي للحالة المستقرة من خلال العلاقة

$$\Psi(\mathbf{r}) = e^{i\, \sigma(\mathbf{r})/\hbar} \qquad (71)$$

يكتب حل المعادلة (65) وفق النشر التالي :

$$\sigma = \sigma_0 + \frac{\hbar}{i}\, \sigma_1 + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \sigma_2 + \dots \qquad (72)$$

فاذا تحقق الشرط (69) تكون الحدود أقل بكثير من التي تسبقها ونستطيع استخدام طريقة التقريب المتتالي لحل المعادلة (65) .

بتعويض العلاقة (72) في المعادلة (65) ومقارنة أمثال الحدود التي لها مرتبة $\hbar$ نفسها نحصل على جملة المعادلات المترابطة التالية :

$$\left.\begin{aligned} &(\vec{\nabla}\sigma_0)^2 + 2\mu[U(r) - E] = 0 \\ &(\vec{\nabla}\sigma_1 \cdot \vec{\nabla}\sigma_0) + \frac{1}{2}\nabla^2\sigma_0 = 0 \\ &(\vec{\nabla}\sigma_1 \cdot \vec{\nabla}\sigma_1) + 2(\vec{\nabla}\sigma_0 \cdot \vec{\nabla}\sigma_2) + \nabla^2\sigma_1 = 0 \end{aligned}\right\} \quad (73)$$

بحل المعادلة الاولى من المجموعة (73) نحصل على σ_0 ، نضعها في المعادلة الثانية ونحلها فنحصل على σ_1 وهكذا ... ويكتفى عادة بـ σ_0 و σ_1 .

ولايضاح هذه الطريقة سنعالج حالة وحيدة البعد فتأخذ مجموعة المعادلات (73) الشكل :

$$\left.\begin{aligned} &(\sigma'_1)^2 = P^2(x) \\ &2\sigma'_1 = -\frac{\sigma''_0}{\sigma'_0} \\ &2\sigma'_2 = -\frac{\sigma''_1 + (\sigma'_0)^2}{\sigma'_0} \end{aligned}\right\} \quad (74)$$

وتشير الفتحة في هذه المعادلات الى الاشتقاق بالنسبة لـ x . وهكذا نحصل على التقريبات المتتالية σ'_1 و σ'_2 من التقريب الصفري

$$\sigma'_0 = \pm P(x) = \pm\sqrt{2\mu[E - U(x)]} \quad (15)$$

فمن المعادلة الثانية في المجموعة (74) نجد :

$$\sigma_1 = - \ln \sqrt{p} + \ln c \qquad (76)$$

وبمكاملة العلاقة (75) بالنسبة لـ x نحصل على σ_0 ونستطيع بعد ذلك مستخدمين العلاقات (76), (72), (71) كتابة التابع الموجي في التقريب شبه الكلاسيكي وهو يحقق معادلة شرودينغر الى حدود من المرتبة $\hbar^2$.

$$\Psi(x) = \frac{c}{\sqrt{|p|}} \exp\{ i \int_0^x k(x') dx' \} +$$

$$+ \frac{c_1}{\sqrt{|p|}} \exp\{ - i \int_0^x k(x') dx' \} \qquad (77)$$

حيث $K(x) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2\mu [E - U(x)]}$

يدعى المجال الذي يحقق المتراجحة $E > U(x)$ بمجال الحركة المسموح كلاسيكياً ويكون التابع $K(x)$ في هذا المجال حقيقياً ، ونعبر عن اندفاع الجسيم بدلالة الاحداثيات ، ونستطيع دوماً ضمن هذا المجال كتابة التابع الموجي $\hbar K(x)$ (77) كتابع مرتبط بثابتين :

$$\Psi(x) = \frac{A}{\sqrt{P}} \sin\{ \int_0^x K(x') dx' + \alpha \}$$

وتكون سعة هذا التابع متناسبة مع $\frac{1}{\sqrt{P}}$ • أي أن احتمال رصد الجسيم ضمن عنصر حجمي صغير ، متناسب مع $\frac{1}{P}$ فهو يتناسب عكساً مع السرعة الكلاسيكية للجسيم ، وتعكس هذه النتيجة انحفاظ الاحتمال ، اذ أن تيار

الاحتمال ضمن هذا التقريب متناسب مع $|A(x)|^2 P(x) = const$.

تدعى قيم x_i التي تتحقق عندها المساواة $E = U(x_i)$ بنقاط الانعطاف الكلاسيكية وتقابل نقاط الفراغ التي يصل الجسيم الكلاسيكي فيها الى حالة الوقوف $P(x_i) = 0$ ثم الحركة وفق الاتجاه المعاكس . يصبح التابع الموجي عند هذه النقاط لا نهائياً ، ويرجع هذا التباعد الى عدم صلاحية التقريب شبه الكلاسيكي عندما يكون الاندفاع صغيراً ، ولتحديد المسافة $|x - x_0|$ التي نستطيع عندها استخدام التقريب شبه الكلاسيكي تنشر الطاقة الكامنة على شكل سلسلة بجوار نقطة الانعطاف x_0 فنكتب :

$$P^2 = 2\mu [E - U(x)] \simeq 2\mu \left|\frac{du}{dx}\right| |x - x_0|$$

بالتعويض في العلاقة (70) نجد أن التقريب شبه الكلاسيكي يصح عند نقطة تبعد عن نقطة الانعطاف مسافة تحقق المتراجحة

$$|x - x_0| >> \frac{1}{2} \left[\frac{\hbar^2}{\mu \left|\frac{du}{dx}\right|} \right]^{1/3} \qquad (78)$$

أو

$$|x - x_0| >> \frac{\hbar}{2p} = \frac{\lambda}{4\pi} \qquad (79)$$

حيث λ هو طول الموجة المقابلة لقيمة الاندفاع عند النقطة x .

يدعى المجال الذي يحقق المتراجحة $E < U(x)$ بالمجال غير المسموح كلاسيكياً ، ويكون التابع $K(x)$ في هذا المجال تخيلياً فنكتب $K(x) = i\chi(x)$ حيث

$$\chi(x) = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2\mu[U(x) - E]}$$

هو تابع حقيقي ، ونستطيع كتابة العلاقة (77) بالشكل :

$$\Psi(x) = \frac{c}{\sqrt{|p|}} \exp\left\{ -\int_0^x \chi(x')\,dx' \right\} +$$

$$+ \frac{c_1}{\sqrt{|p|}} \exp\left\{ \int_0 \chi(x')\,dx' \right\} \qquad (80$$

يتناقص الحد الاول في العلاقة (80) أسياً مع ازدياد x بينما يتزايد الحد الثاني بشكل أسي ، ونستطيع استخدام التقريب شبه الكلاسيكي عندما نعلم مسبقاً كيفية ارتباط الحلين الاهتزازي والأسي عندما نعبر نقطة الانعطاف ، ففي المجال الصغير (a, b) ذي الطول $\left|\frac{du}{dx}\right|^{-1/3} \mu^{-1/3} \hbar^{2/3}$ حول نقطة الانعطاف لا نستطيع استخدام التقريب شبه الكلاسيكي ، ويجب علينا حل معادلة شرودينغر .

١٠ ـ تطبيق طريقة التغيرات في الحسابات التقريبية :

نستطيع في معظم الاحيان استخدام طريقة التغيرات لحساب الحالات المنفصلة الاولى للجملة الكمومية . لا تتطلب طريقة التغيرات معرفة جميع حلول المعادلات الأبسط ، كما لا تحتاج الى نظرية الاضطراب عند حساب القيم الذاتية الاولى لمؤثر هاميلتون .

لحساب طاقة الحالة الاساسية E_0 لجملة ما تؤول طريقة التغيرات الى تطبيق المتراجحة

$$E_0 \leqslant \int \Psi^* \hat{H} \Psi \, d\xi \qquad (81)$$

حيث Ψ هو أي تابع منظم

$$\int \Psi^* \Psi \, d\xi = 1 \qquad (82)$$

و $\hat{H}$ هو مؤثر هاميلتون الكلي للجملة .

نستطيع بسهولة اثبات صحة المتراجحة (81) باستخدام التمثيل الطاقي ، فإذا رمزنا لمجموعة التوابع الذاتية التامة للمؤثر $\hat{H}$ بـ φ_n ، فيمكننا نشر أي تابـع Ψ بدلالة φ_n أي :

$$\psi = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \varphi_n, \quad \sum_{n=0}^{\infty} |a_n|^2 = 1. \qquad (83)$$

بالتعويض في المعادلة (81) نجد :

$$\int \psi^* \hat{H} \psi \, d\xi = \sum_{n=0}^{\infty} |a_n|^2 E_n \geq E_0 \sum_{n=0}^{\infty} |a_n|^2 = E_0 .$$

وهكذا نردّ حساب الحالة الاساسية للجملة الى ايجاد النهاية الصغرى للتكامـل $\int \Psi^* \hat{H} \Psi \, d\xi$ أي :

$$E_0 = \mathrm{Min} \int \Psi^* \hat{H} \Psi \, d\xi \qquad (84)$$

ان الحساب العملي لطاقة الحالة الاساسية باستخدام العلاقة (84) ينطلق من اختيار تابع تجريب مناسب Ψ يحوي عدداً من المعاملات المجهولة α ، β ، ... فبعد حساب التكامل $\int \Psi^* (\xi ; \alpha, \beta, \ldots) \hat{H} \Psi (\xi ; \alpha \beta, \ldots) \, d\xi$ نحصل على الصيغة $J(\alpha, \beta, \ldots)$ المرتبطة بالمعاملات α , β , ...

ان تحديد قيم المعاملات المطلوبة يتم بالبحث عن النهاية الصغرى لـ $J(\alpha, \beta, \ldots)$ أي حل المعادلات

$$\frac{\partial J}{\partial \alpha} = \frac{\partial J}{\partial \beta} = \ldots = 0$$

فإذا كان اختيار تابع التجريب ملائماً فإن القيمة

$$E = J(\alpha_0, \beta_0, \ldots)$$

التي حصلنا عليها بالأسلوب المذكور أعلاه تكون أقرب ما يمكن للقيمة الفعلية لـ E_0 وكذلك يعطى التابع الموجي للحالة الاساسية بصورة تقريبية بالتابع

$$\Psi(\xi; \alpha_0, \beta_0, \ldots)$$

اذا رمزنا للتابع الموجي الممثل للحالة الاساسية بـ Ψ_0 فإن حساب الطاقة E_1 للحالة المثارة الاولى يؤول الى حل مسألة المتغيرات

$$E_1 = \text{Min} \int \Psi^*_1 \hat{H} \Psi_1 \, d\xi \qquad (85)$$

الخاضعة للشرطين

$$\int \Psi^*_1 \Psi_1 \, d\xi = 1 \quad , \quad \int \Psi^*_1 \Psi_0 \, d\xi = 0 \qquad (86)$$

ولاثبات هذا الأمر تتبع الأسلوب نفسه كما في الحالة الاساسية منتبهين الى غياب φ_0 من نشر Ψ_1 نتيجة شرط التعامد (86) أي

$$\psi_1 = \sum_{n=1}^{\infty} b_n \varphi_n, \quad \sum_{n=1}^{\infty} |b_n|^2 = 1.$$

ان حساب طاقة الحالة المثارة الثانية E_2 ماهو الا حل مسألة التغيرات

$$E_2 = \text{Min} \int \Psi^*_2 \hat{H} \Psi_2 \, d\xi \qquad (87)$$

الخاضعة للشروط

$$\int \Psi^*_2 \Psi_2 \, d\xi = 1 \quad , \quad \int \Psi^*_2 \Psi_1 \, d\xi = \int \Psi^*_2 \Psi_0 \, d\xi = 0 \quad (88)$$

مسائل

١ ـ أثبت أنه اذا حققت المقادير L, M, N علاقة التبادل $[L, M] = iN$ في تمثيل شرودينغر فإن هذه العلاقة تبقى محققة في التمثيلات الأخرى .

٢ ـ اذا عاملنا الاحداثي x كمؤثر في تمثيل شرودينغر فماهو المؤثر x_H المقابل في تمثيل هايزنبرغ في حالة جسيم حر ؟ وفي حالة الهزاز التوافقي ؟

٣ ـ أوجد العلاقات التبادلية التالية في حالة الهزاز التوافقي

$$[P_H(t_1), x_H(t_2)] \quad , \quad [P_H(t_1), P_H(t_2)] \quad , \quad [X_H(t_1), X_H(t_2)]$$

٤ ـ اذا رمزنا لمؤثر التحويل بين تمثيل هايزنبرغ وتمثيل التفاعل بالرمز

$S(t, t_0) = U^{(0)+}(t, t_0)\, U(t, t_0)$ أثبت أن هذا المؤثر هو حل المعادلة التفاضلية

$$i\hbar \frac{\partial S(t, t_0)}{\partial t} = H'_I \, S(t, t_0)$$

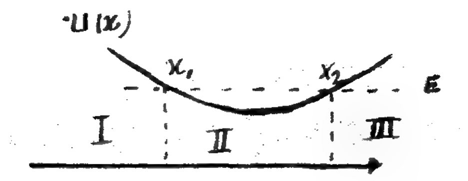
التي تحقق الشرط $S(t_0, t_0) = 1$.

٥ ـ عيّن صيغة المؤثر $S(t, 0)$ في المسألة (٤) من أجل هزاز توافقي وحيد البعد كتلته m وشحنته e موجود ضمن حقل كهربائي ثابت الشدة E أي :

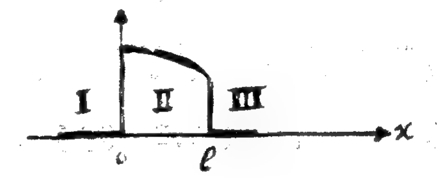
$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} - eEx \ ، H_0 = \frac{P^2}{2m} + m\frac{\omega^2 x^2}{2}$$

$$H' = -eEx$$

٦ ــ استخدم التقريب شبه الكلاسيكي لحساب سويات الطاقة والتابع الموجي لجسيم كتلته μ يتحرك ضمن البئر الكموني المجاور.



٧ ــ استخدم التقريب شبه الكلاسيكي لدراسة حركة جسيم ضمن حقل الطاقة الكامنة المبينة بالشكل المجاور.



٨ ــ أوجد مستخدماً طريقة المتغيرات القيم الذاتية والتوابع الموجية لهزاز توافقي وحيد البعد منطلقاً من التابع

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2\mu}\frac{d_2}{dx^2} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2 \qquad \Psi(x;\alpha) = A e^{-\frac{1}{2}\alpha x^2}.$$

٩ ــ أوجد مستخدماً طريقة المتغيرات الطاقة والتابع الموجي لذرة الهيدروجين

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2\mu} - \frac{e^2}{r}$$ منطلقاً من التابع $\Psi = A e^{-\beta r}$.

★ ★ ★

الفصل الثاني

النظرية النسبوية الكمومية

النظرية النسبوية الكمومية لحركة جسيم ضمن حقل خارجي

١ ـ الجسيمات الاولية في الميكانيك الكمومي :

يوجد ، في الوقت الحالي ، عدد كبير من الجسيمات مثل الالكترونات Electrons والبروتونات Protons والنترونات Netrons والبيونات Pions والميونات Muons والكاونات Kaons ، وغيرها تدعى بالجسيمات الاولية (انظر ملحق تصنيف الجسيمات الأولية) • لا نستطيع في هذه المرحلة من معرفتنا أن نتحدث عن بنائها الداخلي • تتميز هذه الجسيمات بكتل سكونية محددة القيم، ويمكن أن تكون معتدلة كهربائياً أو تحمل شحنة موجبة أو سالبة •

تتميز الجسيمات الأولية أيضاً بشحنة غير كهربائية ، فللجسيمات الخفيفة مثل الالكترونات والميونات والنترينوات Neutrinos ، شحنة باريونية Baryon بينما لا تملك البيونات والكاونات والميزونات الثقيلةالاخرىشحنة باريونيةأو شحنة ليبتونية Lipton •

ومن أهم الخواص المميزة للجسيمات الاولية ، امكان احداثها وامكان افنائها أو تحويلها منشكل لآخر كنتيجة للتفاعل • يتم مثلاً احداث فوتونات عندما تغير الالكترونات في الذرة أو النكليونات في نواة الذرة ، طبيعة حركاتها • كما يتم احداث البيونات عند تصادم نكليونين لكل منهما طاقة عالية • يصدر النترون الكتروناً ونتروناً مضاداً عندما يتحول الى بروتون • كما يتحول البيون المشحون الى ميون ونترينو ، ويمكن للفوتونات أن تتحول ضمن حقل النواة الى الكترون وبوزيترون وهكذا •••

ان اكتشاف امكان احداث الجسيمات الاولية ، وافنائها أو تحويلها وارتباط هذه العمليات بانحفاظ الطاقة وانحفاظ الشحنة ، يعد مفتاحاً مهماً لإدراك وفهم خواص عالمنا ، وكذلك ادراك العلاقة بين مختلف الظواهر الطبيعية وفهمها • تتفاعل الجسيمات من نوع معين بواسطة جسيمات من نوع آخر فتقوم البيونات المشحونة والبيونات المعتدلة ، مثلاً ، بنقل التفاعلات النووية بين النكليونات ، أي أن البروتونات والنترونات تحاط بسحابة ميزونية تؤمن التفاعل فيما بينها • وتشكل هذه السحابة الميزونية جزءاً أساسياً من البروتونات والنترونات وتحدد خواصها ، وبالمقابل تحدد البروتونات والنترونات خواص البيونات ولا يبقى لمفهوم الجسيم المعزول أي معنى •

أي أن الحركة الحرة للجسيم ماهي الا وصف تقريبي للواقع • كما أن فكرة ثبات عدد الجسيمات تفقد معناها وخاصة عند دراسة الظواهر المتضمنة جسيمات ذات طاقة عالية • فالالكترون السريع الطائر في حقل النواة يُنتج فوتونات كما تنتج الفوتونات في حقل النواة زوجاً من الجسيمات (الكترون وبوزيترون) وهي بدورها تُنتج فوتونات •

لا بد من استخدام المعادلات الموجية النسبوية عند معالجة الظواهر التي تحدث في الطاقات العالية، أي أننا نحتاج الى معادلات صامدة عند تطبيق تحويلات لورنتز عليها • يتطلب الانتقال من الوصف غير النسبوي الى الوصف النسبوي اعادة النظر في عدد من الافكار ، وكخطوة أولى يجب تغيير فكرة احداثيات الجسيم المنفصل ، فمن الممكن في ميكانيك الكم غير النسبوي تحديد موضع الجسيم في المكان والزمان بدقة اختيارية ، أما في حالة الجسيمات النسبوية مثل فوتونات الضوء فلا يكون لفكرة احداثيات الجسيم أي معنى على الاطلاق •

واذا كان الموضع غير محدد بصورة دقيقة $\Delta x > \frac{\hbar}{mc}$ ، يكون الزمن

أيضاً غير محدد $\Delta t \sim \frac{\Delta x}{c}$ ، لذلك لا بد من اعادة النظر في فكـرة كثافـة الاحتمال $\rho(x, y, z, t)$ التي تعطي احتمال موضع جسيم يملك اندفاعاً محدداً. ففي النظرية غير النسبوية نجعل $c \to \infty$ ويمكن لـ Δt أن تأخذ قيمة معدومة. أما الفكرة الاساسية الثانية في النظرية غير النسبوية فهي اندفاع الجسيم ، ان الريبة في قيمة الاندفاع تتحدد بالعلاقة $\Delta p \sim \hbar/\Delta x$ ، وبما أن الريبـة في سرعـة الجسيم لا تزيدعلى c في النظرية النسبوية ، فان $\Delta x \sim c\Delta t$ ، حيث Δt هي فترة التأكد من حالة الحركة . لذلك نجد $\Delta p \sim \hbar/c\Delta t$. ففي الحالـة المستقرة للجسيم الحر $\Delta t \sim \infty$ يكون $\Delta p = 0$. أي أنه في حالة الحركـة الحرة للجسيم وعندما لا يتغير الاندفاع مع الزمن ، لا يكون هناك معنى للحديث في حالات توصف بالسحابة الموجية ، عن كثافة الاحتمال في فراغ الاندفاعات من أجل قيمة محددة للاندفاع ، لذلك يفضل استخدام تمثيل الاندفاعات عوضاً عـن تمثيل الموضع في النظرية النسبوية .

طورت في السنوات الاخيرة النظرية النسبوية للجسيمات الاولية انطلاقاً مـن فكرة الحقول المتفاعلة ، أي عدت الجسيمات حبيبات للحقل . يؤمن مثل هذا العد تفسيراً بسيطاً لعمليات الخلق والافناء والتحول في الطاقات العالية . وتعترض مثل هذه النظرية صعوبات رياضية كثيرة متمركزة في التحريك الكهربائي الكمومي، حيث يُدرس التفاعل بين الالكترونات والحقول الكهرطيسية .

ان نظرية التفاعل للميزونات مع الجسيمات الاولية الاخرى مثل الهايبرونات وكذلك نظرية الجسيمات الاولية نفسها ، لا تزال في مراحل تطورها الابتدائية في الوقت الحاضر . وبرغم كون فكرة تكوين الجمل من عدد محدود من الجسيمات هي فكرة تقريبية للظاهرة التي تحدث في الطاقات العالية ، الا أنـه يمكن استخدامها كمرحلة أولى في تطوير نظرية أكثر اقتراباً من الواقع . ولسوف ينشأ عـن هـذا التبسيط عدد من الصعوبات مردّها اهمال العلاقة المستمرة بين مختلف الجسيمات، وتحوّل مجموعة منها الى أشكال مختلفة .

٢ ـ المعادلة النسبوية لجسيم معدوم السبن :

ان معادلة شرودينغر لجسيم كتلته M ويخضع لتأثير الكمون $U(x)$ هي :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = [- \frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 + U(x)] \Psi \qquad (1)$$

وتقابل العلاقة غير النسبوية

$$E = \frac{P^2}{2M} + U(x) \qquad (2)$$

بين الطاقة والاندفاع لجسيم كتلته M ◦ وبالطبع نستطيع أن نتوصل الى المعادلة (1) من المعادلة (2) باستخدام التحويل :

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad ; \quad \hat{P} = \rightarrow - i\hbar \vec{\nabla} \qquad (3)$$

فإذا أردنا الحصول على المعادلة الموجية لحركة جسيم طاقته أكبر بكثير من كتلته السكونية ، يجب أن نبدأ من العلاقة النسبوية بين الطاقة والاندفاع ◦ ففي حالة الجسيم الحر لدينا :

$$\frac{E^2}{C^2} = P^2 + M^2 C^2 \qquad (4)$$

فإذا استخدمنا التحويل (3) في المعادلة (4) نحصل على المعادلة الموجية النسبوية للجسيم الحر :

$$\frac{\hbar^2}{C^2} \frac{\partial_2 \Psi}{\partial t^2} = [\hbar^2 \nabla^2 - M^2 C^2] \Psi \qquad (5)$$

تدعى هذه المعادلة بمعادلة كلاين ــ غوردن •

يمكن اظهار خاصة الصمود النسبوي للمعادلة (4) بتعريف شعاع الاندفاع رباعي المركبات $P_\mu \{ P_1 , P_2 , P_3 , i\frac{E}{C} \}$ فتصبح المعادلة (4) بالشكل

$$\sum_{\mu=1}^{4} p_\mu^2 = -M^2c^2.$$

أما المعادلة (3) فتصبح من الشكل $P_\mu \to \hat{P}_\mu = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_\mu}$ حيث $x_\mu \equiv (x, y, z, ict)$ • فباستخدام هذه الرموز تأخذ المعادلة (5) الصيغة :

$$\left[\sum_\mu \hat{p}^2 + M^2c^2\right] \psi = 0. \qquad (6)$$

اذا ضربنا طرفي العلاقة (5) بـ Ψ^* وطرحنا من المعادلة الناتجة مرافقها العقدي نحصل على معادلة الاستمرار

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} j = 0 \qquad (7)$$

حيث

$$j = \frac{\hbar}{2Mi} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) \qquad (8)$$

$$\rho = \frac{i\hbar}{2Mc^2} (\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t}) \qquad (9)$$

وتأخذ المعادلة (7) الشكل الصامد

$$\sum_\mu \frac{\partial j_\mu}{\partial x_\mu} = 0, \quad j_\mu = \frac{\hbar}{2Mi}\left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x_\mu} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x_\mu}\right),$$

حيث $j_\mu \equiv (j_1, j_2, j_3, ic\rho)$

نستطيع الانتقال من المعادلة النسبوية (5) الى معادلة شرودينغر غير النسبوية من خلال التحويل الواحدي (Unitary)

$$\Psi(r,t) = \varphi(r,t)\, e^{-Mc^2 t/\hbar} \qquad (10)$$

ففي الحالة غير النسبوية تختلف قليلاً الطاقة الكلية للجسيم ، عن طاقة الكتلة السكونية أي $E = E' + Mc^2$ $\quad E' << Mc^2$

$$\left| i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} \right| \sim E'\varphi << Mc^2 \varphi$$

لذلك نستطيع أن نكتب

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} - \frac{iMc^2}{\hbar} \right) e^{-iMc^2 t/\hbar} \simeq - \frac{iMc^2}{\hbar} \varphi\, e^{-iMc^2 t/\hbar} \qquad (11)$$

$$\frac{\partial_2 \Psi}{\partial t^2} \simeq - \left[\frac{2\, iMc^2}{\hbar} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{M^2 c^4}{\hbar^2} \varphi \right] e^{-iMc^2 t/\hbar} \qquad (12)$$

باستخدام المعادلة (10) و (12) نحصل على المعادلة (5) وهي معادلة شرودينغر غير النسبوية للتابع φ .

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = - \frac{\hbar}{2M} \nabla^2 \varphi$$

بتعويض المعادلة (10) في (8) و (9) نستطيع مشاهدة النهاية غير النسبوية فإذا استخدمنا المعادلة (11) تأخذ المعادلات (8) و (9) الاشكال المعروفة في الميكانيك الكمومي غير النسبوي لكلٍ من التيار والكثافة

$$\rho = \varphi^* \varphi \quad ; \quad j = \frac{\hbar}{2Mi} (\varphi^* \nabla \varphi - \varphi \nabla \varphi^*)$$

ان الخاصة الأساسية للمعادلة النسبوية (5) هي كونها معادلة من المرتبة الثانية بالنسبة للزمن • ولتعين تغير التابع الموجي مع الزمن يجب معرفة قيم التابع وقيم مشتقه الأول بالنسبة للزمن في لحظة معينة • وبما أن قيم Ψ و $\frac{\partial \Psi}{\partial t}$ في لحظة معينة هي اختيارية ، فان ρ المعرّفة بالعلاقة (9) تأخذ قيماً موجبة أو سالبة أو الصفر • لذلك لا يمكن عد ρ أنها كثافة الاحتمال لقيم محددة من احداثيات الجسيم •

ترتبط الخاصة الثانية للمعادلة (5) بقواعد التحويل للتوابع الموجية Ψ فمن أجل التحويلات الى جمل من احداثيات متعامدة

$$x'_\mu = \sum_\nu a_{\mu\nu} x_\nu, \quad \sum_\mu a_{\mu\nu} a_{\mu\nu'} = \delta_{\nu\nu'}, \tag{13}$$

حيث $\mu, \nu = 1, 2, 3, 4$ ، لا تتغير قيمة الشعاع (طوله) نتيجة الانتقال من جملة احداثيات رباعية الى جملة أخرى • وتقابل دوراناً في الفراغ الثلاثي (تحويل لورنتزي ملائم) أو انعكاساً • يجب أن تحافظ المعادلات الموجية النسبوية على شكلها عند خضوعها الى التحويلات (13) • ومن الملائم أن نستخدم الشكل الصامد (6) لمعادلة كلاين غوردن من أجل دراسة خواص التحويل للتوابع الموجية •

بما أن طول الشعاع رباعي المركبات لا يتغير مع تحويل الاحداثيات (13) لذلك ينتج من المعادلة (6) أن عملية التحويل تكافىء ضرب التابع الموجي بمعامل قيمته الواحد ، فعندما نجري تحويل الاحداثيات وفق العلاقة (13) والتي نكتبها بالشكل :

$$\mathbf{x} \longrightarrow \mathbf{x}' = a\mathbf{x} \tag{13'}$$

يأخذ التابع الموجي للمعادلة (5) الشكل

$$\Psi(x) \longrightarrow \Psi'(x') = \lambda\Psi(x) \qquad (14)$$

حيث $|\lambda| = 1$. اذا كان $\lambda = +1$ أي $\Psi'(-r,t) = \Psi(r,t) = \Psi(r',t')$ دعي التابع Ψ بأنه تابع سلمي (scalar) • أما اذا كان $\lambda = -1$ أي $\Psi(-r',t') = -\Psi(r^*,t^*)$ دعي التابع Ψ بأنه تابع سلمي كاذب (pseudoscalar) •

تصف التوابع السلمية والتوابع السلمية الكاذبة جسيمات ذات سبن معدوم وبسبب امكان خلق أزواج الجسيمات وافنائها لا يكون عدد الجسيمات محافظاً في النظرية النسبوية ، ولكن الشحنة الكلية محافظة لذلك يفضل استخدام التوزع الاحتمالي للشحنة الكهربائية عوضاً عن التوزع الاحتمالي لاحداثيات الجسيم •

نجد بضرب العلاقتين (8) , (9) بشحنة الالكترون :

$$j = \frac{e\hbar}{2Mi}\left(\Psi^* \vec{\nabla}\Psi - \Psi\vec{\nabla}\Psi^*\right) \qquad (15)$$

$$\rho = \frac{ie\hbar}{2Mc^2}\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t} - \Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\right) \qquad (16)$$

وفي هذه الحالة تمثل j كثافة التيار الكهربائي ، وكذلك تمثل ρ كثافة الشحنة الكهربائية وتستطيع تفسير القيمة السالبة والموجبة والصفر فهي تشير الى نوع الشحنة • فاذا استخدمنا معادلة الاستمرار (7) تتوصل الى قانون انحفاظ الشحنة الكلية : $\int \rho d_3r = c$ • تحدد كثافة الشحنة ρ الفرق بين عدد الشحنات الموجبة وعدد الشحنات السالبة ، ولا تأخذ العلاقتان (15) , (16) دورهما الا عند تفاعل الجسيمات مع الحقول الكهرطيسية •

٣ ـ الجسيمات الحرة ذات السبن المعدوم :

ان فكرة الحركة الحرة للجسيم بعيدة عن الواقع في حالـة الجسيمات ذات السبن المعدوم مثل البيونات والكاونات لأنها تتفاعل بشدة مع الجسيمات الأخرى ومع الحقول • ومع ذلك فاننا سندرس حلول المعادلة (5) من أجل جسيم حـر معدوم السبن لأن للأسلوب المتبع أهمية كبيرة •

سنبحث عن حل للمعادلة (5) يقابل حالة ذات اندفـاع محـدد أي مـن الشـكل :

$$\Psi = e^{i[(p\cdot r) - \epsilon t]/\hbar} \tag{17}$$

بتعويض الحل (17) في المعادلة (5) نجد أن هذا الحل يحقق المعادلة من أجـل :

$$E_p = c\sqrt{p^2 + M^2c^2} \tag{18}$$

حيث $\epsilon = \pm E_p$

فللمعادلة (5) نوعان من الحلول

$$\Psi(+) = A_1 e^{i[(p\cdot r) - E_p t]/\hbar} \tag{19}$$

$$\Psi(-) = A_2 e^{i[(p\cdot r) + E_p t]/\hbar} \tag{20}$$

بالتعويض في المعادلة (16) نجد :

$$\rho_\lambda = \frac{\lambda e\ E_p}{Mc^2} \Psi^*_\lambda\ \Psi_\lambda \qquad (21)$$

يقابل الحل (+) Ψ حركةً حرةً لجسيم اندفاعه p وشحنته e ، بينما تقابل الحلول (−) Ψ حركةً حرةً لجسيم اندفاعه p وشحنته سالبة • اذا طبقنا على الحركة الحرة للجسيمات شروطاً حدية دورية بدور كبير L وفق المحاور الديكارتية ، أخذت مركبات الشعاع الموجي قيماً منفصلة

$$k_i = \frac{2\pi}{L} n_i ;\quad n_i = 0, \mp 1, \mp 2, \dots , i = 1, 2, 3 \qquad (22)$$

وفي هذه الحالة يأخذ الحل العام الشكل :

$$\psi_\lambda = L^{-3/2} \sum_k A_k\, e^{i[(k\cdot r) - \lambda\omega(k)t]}, \quad \omega(k) = E_p/h. \qquad (23)$$

أي أن الانتقال الى الميكانيك الكمومي النسبوي أدى الى ظهور درجة جديدة من الحرية بالمقارنة مع المعادلة غير النسبوية • ففي النظرية غير النسبوية يوجد حالة واحدة للحركة الحرة من أجل اندفاع محدد ، بينما نجد في النظرية النسبوية للجسيمات المشحونة عديمة السبن ثلاثة حلول تقابل ثلاث قيم ممكنة لشحنة الجسيم ، أي أن درجة الحرية الجديدة ترتبط بالشحنة الكهربائية للجسيم •

ولكي نرى هذه الدرجة الجديدة من الحرية بوضوح أكثر سنعيد كتابة المعادلة (5) للتابع الموجي المركب ، على شكل مجموعة من معادلتين تفاضليتين خطيتين من المرتبة الاولى بالنسبة للزمن للتابعين الموجيين φ , x فنكتب :

$$\Psi = \varphi + x \quad ; \quad i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = Mc^2 (\varphi - x) \qquad (24)$$

ويمكننا بسهولة أن تتأكد أن مجموعة المعادلتين

$$i\hbar \frac{\partial\varphi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 (\varphi + x) + Mc^2 \varphi$$
$$i\hbar \frac{\partial x}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 (\varphi + x) - Mc^2 x \quad (25)$$

تكافىء تماماً المعادلة (5) .

ولتبسيط هذه المعادلات نفترض أن φ , x هما مركبتا التابع Ψ الـذي يكتب على شكل مصفوفة من عمود واحد :

$$\Psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ x \end{pmatrix} \quad (26)$$

سنعرّف الآن المصفوفات الأربع التالية :

$$\hat{\tau}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} ; \quad \hat{\tau}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} ;$$
$$\hat{\tau}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} ; \quad \hat{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (27)$$

التي تحقق العلاقات :

$$\hat{\tau}_k^2 = \hat{I}, \quad \hat{\tau}_k\hat{\tau}_l = -\hat{\tau}_l\hat{\tau}_k = i\hat{\tau}_m,$$

تأخذ الأدلة k, l, m القيم $1, 2, 3$ بترتيب دوري . نستطيـع أن نكتـب مجموعة المعادلات (25) على شكل معادلة واحدة وفق الصيغة الهاميلتونية :

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}_f\right) \Psi = 0 \quad (28)$$

وهي معادلة كلاين ـ غوردن حيث يأخذ مؤثر هاميلتون الصيغة :

$$\hat{H}_f = (\hat{\tau}_3 + i\,\hat{\tau}_2)\,\frac{p^2}{2M} + Mc^2\,\hat{\tau}_3 \qquad (29)$$

بتطبيق المؤثر $i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + \hat{H}_f$ على المعادلة (28) وباستخدام العلاقة $\hat{H}_f^2 = c^2\hat{p}^2 + M^2c^4$ نحصل على معادلة من المرتبة الثانية هي :

$$[\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} + c^2 p^2 + M^2 c^4]\,\Psi = 0$$

والتي تشير الى أن كل مركبة من التابع (26) تحقق المعادلة (5) . بتعويض المعادلة (24) في المعادلة (16) وباستخدام المعادلة (26) و (27) نحصل على الصيغة التالية التي تعطي كثافة الشحنات الكهربائية

$$\rho = e(\varphi^*\varphi - x^*x) = e\,\Psi^+\,\hat{\tau}_3\,\Psi \qquad (30)$$

حيث $\Psi^+ = (\varphi^*, x^*)$ هو المرافق الهرميتي للتابع (26) . وبالمثل نستطيع كتابة العلاقة (15) التي تعطي كثافة التيار بالشكل :

$$j = \frac{e\hbar}{2Mi}[\Psi^+\,\hat{\tau}_3(\hat{\tau}_3 + i\,\hat{\tau}_2)\,\nabla\Psi - (\Delta\Psi^+)\,\hat{\tau}_3(\hat{\tau}_3 + i\,\hat{\tau}_2)\,\Psi] \qquad (31)$$

ولقد ذكرنا سابقاً أن معادلة الاستمرار (7) تقود الى انحفاظ الشحنة ا

$$\int \rho\, d_3 r = e \int \Psi^+\,\hat{\tau}_3\,\Psi\, d_3 r$$

وذلك باجراء المكاملة على كل قيم متحولات التابع . فمن أجل حركة حرة لجسيم واحد يُنظَّم هذا المقدار الى القيمة $+e$ أو $-e$ وفقاً لاشارة شحنة الجسيم .

ويؤدي شرط التنظيم الى العلاقة :

$$\int \Psi^{+} \hat{\tau}_3 \Psi \, d_3 r = \int (\varphi^* \varphi - x^* x) \, d_3 r = \pm 1 \qquad (32)$$

لندرس الآن الحركة الحرة لجسيم معدوم السبن ضمن الحجم V فاذا كتبنا

$$\Psi = V^{-1/2} \begin{pmatrix} \varphi_0 \\ x_0 \end{pmatrix} e^{i[(p \cdot r) - \epsilon t]/\hbar} \qquad (33)$$

وعوضنا هذا الحل في المعادلة (28) حصلنا على مجموعة المعادلتين :

$$(\epsilon - Mc^2)\varphi_0 = \frac{p^2}{2M}(\varphi_0 + x_0)$$

$$(\epsilon + Mc^2) x_0 = \frac{-p^2}{2M}(\varphi_0 + x_0)$$

ان شرط وجود حل غير تافه لهاتين المعادلتين هو :

$$E_p = c\sqrt{p^2 + M^2 c^2} \; ; \quad \epsilon = \pm E_p$$

فاذا كان $\epsilon = E_p$ يكون للتابع $\Psi(+)$ المركبات

$$\varphi_0(+) = \frac{E_p + Mc^2}{2\sqrt{Mc^2 E_p}} \; ; \quad x_0(+) = \frac{Mc^2 - E_p}{2\sqrt{Mc^2 E_p}} \qquad (34)$$

وقد تم حساب ثابت التنظيم باستخدام المعادلة :

$$\varphi_0(+)\varphi_0(+) - x_0(+)x_0(+) = 1 \qquad (35)$$

تمثل الحلول المقابلة لـ $\epsilon = E_p$ حركة جسيم يملك شحنة موجبة ونطلق على هذه الحلول اسم الحلول الموجبة وتقابل التنظيم الموجب في العلاقة (32) .

أما اذا كان $\epsilon = - E_p$ فيكون للتابع Ψ (-) المركبتان

$$\varphi_0(-) = \frac{Mc^2 - E_p}{2\sqrt{Mc^2 E_p}} \quad ; \quad x_0(-) = \frac{Mc^2 + E_p}{2\sqrt{Mc^2 E_p}} \qquad (36)$$

وفي هذه الحالة يكون : $\varphi_0(-)\varphi_0(-) - x_0(-)x_0(-) = -1$ وتقابل حركة جسيم شحنته سالبة وتدعى بالحلول السالبة وتقابل التنظيم السالب في العلاقة (32) .

يكون في التقريب غير النسبوي $E_p \simeq Mc^2 + \frac{p^2}{2M}$ ويكون للتوابع الموجية قيم من المرتبة التالية :

$$\left.\begin{array}{ll} \varphi_0(+) \sim 1 & |x_0(+)| \sim \left(\frac{p}{2Mc}\right)^2 = \left(\frac{v}{2c}\right)^2 << 1 \\ |\varphi_0(-)| \sim \left(\frac{p}{2Mc}\right)^2 = \left(\frac{v}{2c}\right)^2 << 1 \;; & x_0(-) \sim 1 \end{array}\right] \qquad (37)$$

يتضح من العلاقات (33) ، (35) ، (36) أنه اذا قابل التابع $\Psi = \binom{\varphi}{x}$ حلاً لجسيم شحنته موجبة فان التابع $\Psi = \binom{x^*}{\varphi^*}$ يقابل حلاً لجسيم شحنته سالبة والعكس بالعكس . ويدعى أحدهما بالمرافق الشحني للآخر ويرتبطان بالعلاقة

$$\Psi_c = \hat{\tau}_1 \Psi^*$$

٤ ـ التفاعل بين الجسيم عديم السبن والحقول الكهرطيسية :

من المعروف في (الإلكتروديناميك) الكلاسيكي أننا نستطيع الانتقال من التابع الهاميلتوني للجسيم الحر $E = \sqrt{M^2c^4 + P^2c^2}$ الى التابع الهاميلتوني لجسيم مشحون يتحرك ضمن حقل كهرطيسي معين بالكمونين

$$A_\mu = (A_1, A_2, A_3, i A_0) \qquad (38)$$

وذلك باستخدام التحويل

$$\left.\begin{array}{l} E \longrightarrow E - eA_0 \\ P \longrightarrow P - \dfrac{e}{c} A \end{array}\right\} \text{ أو } P_\mu \longrightarrow P_\mu - \frac{e}{c} A_\mu \qquad (39)$$

ان الانتقال من المعادلة الكمومية (6) الممثلة للحركة الحرة ، الى المعادلة الكمومية الممثلة لحركة جسيم مشحون ، يتم كما في الميكانيك الكلاسيكي وذلك باجراء التحويل

$$\hat{P}_\mu \longrightarrow \hat{P}_\mu - \frac{e}{c} A_\mu = - i\hbar \frac{\partial}{\partial x_\mu} - \frac{e}{c} A_\mu \qquad (40)$$

على المعادلة (6) ، فنحصل على المعادلة الموجية النسبوية :

$$\left\{\sum_\mu \left(\hat{p}_\mu - \frac{e}{c} A_\mu\right)^2 + M^2c^2\right\} \psi = 0, \qquad (41)$$

أو

$$\frac{1}{c^2} [i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - eA_0]^2 \Psi = [(\hat{P} - \frac{e}{c} A)^2 + M^2 c^2] \Psi \qquad (42)$$

يكون التابع Ψ في المعادلة (41) عقدياً لأن الجسيمات المشحونة توصف بتوابع عقدية. اذا ضربنا المعادلة (42) من اليسار بالتابع Ψ^* وطرحنا من المعادلة الناتجة مرافقها العقدي حصلنا على معادلة الاستمرار (7) . وتعطى كثافة الشحنات الكهربائية وكثافة التيار بوجود الحقل الكهرطيسي بالعلاقتين :

$$\rho = \frac{ie\hbar}{2Mc^2}\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t} - \Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\right) - \frac{e^2 A_0}{Mc^2}\Psi^*\Psi \qquad (43)$$

$$j = \frac{e\hbar}{2Mi}\left(\Psi^*\vec{\nabla}\Psi - \Psi\vec{\nabla}\Psi^*\right) - \frac{e^2 A}{Mc}\Psi^*\Psi \qquad (44)$$

وينتج عن الشكل الصامد (41) أن وجود الحقل الكهرطيسي لا يؤثر على خاصة الصمود عند التحويل اللورنتزي ، ومن المعروف أننا نستطيع وصف الحقل الكهرطيسي بكمونات مختلفة ترتبط فيما بينها بالتحويل القياسي « gauge »

$$A_\mu = A'_\mu + \frac{\partial}{\partial x_\mu} G$$

حيث G تابع اختياري . وهذا يعني:

$$\left(\hat{P}_\mu - \frac{e}{c}A_\mu\right) e^{ieG/\hbar c}\,\Psi' = e^{ieG/\hbar c}\left(\hat{P} - \frac{e}{c}A'_\mu\right)\Psi'$$

وكأن التحويل القياسي للكمونات مصحوب بتحويل طوري واحدي

$$\Psi = \Psi' e^{ieG/\hbar c}$$

مؤدياً الى بقاء المعادلة (41) صامدة . وبما أن التحويلات الواحدية لا تغير من الخواص الفيزيائية للجملة نستطيع أن نقول ان المعادلة (41) لا تتأثر بالتحويل

القياسي للكمونات • ونستطيع باستخدام التحويل القياسي التوصل الـى كمونات تحقق العلاقة :

$$\frac{1}{c}\,\frac{\partial A_0}{\partial t} + (\nabla \cdot A) = 0 \qquad (45)$$

فباجراء التحويل

$$\Psi(r,t) = \varphi(r,t)\, e^{-iMc^2 t/\hbar} \qquad (46)$$

نجـد

$$(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\, e A_0)^2\, \Psi(r,t) \simeq e^{-iMc^2 t/\hbar}$$

$$\times\, [\, M^2c^4 - 2Mc^2 eA_0 + 2Mc^2 i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - ie\hbar\frac{\partial A_0}{\partial t}\,]\,\varphi$$

$$(\hat{P} - \frac{e}{c}A)^2\, \Psi(r,t) \simeq e^{-iMc\ \ t/\hbar}$$

$$\times\, [\ \hat{P}^2 - \frac{2e(A\cdot\hat{P})}{c} + \frac{e^2}{c^2}A^2 + \frac{ie\hbar}{c}(\nabla \cdot A)\,]\,\varphi$$

بتعويض هاتين المعادلتين في (42) واستخدام (45) تتوصل الى معادلة شرودينغر غير النسبوية التي تصف حركة جسيم مشحون عديم السبن في حقل كهرطيسي

$$i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t} = [\,\frac{\hat{P}^2}{2M} - \frac{e}{Mc}\ \ A\cdot\hat{P}) + \frac{e^2}{2Mc^2}A^2 + eA_0\,]\,\varphi \qquad (47)$$

ولدراسة الحالات المستقرة للجسيم في حقل كهرطيسي يجب وضع

$$\Psi(r,t) = \Psi(r)\, e^{-i\in t/\hbar} \qquad (48)$$

في المعادلة (42) عندها سيحقق التابع $\Psi(r)$ المعادلة :

$$\frac{1}{c^2}(\epsilon - eA_0)^2 \Psi(r) = [\hat{P}^2 - \frac{2e}{c}(A \cdot \hat{P}) \frac{e^2}{c^2} A^2 + $$

$$+ M^2 c^2] \Psi(r) \qquad (49)$$

ففي الحالات المستقرة (48) تعطى كثافة الشحنة الكهربائية بالعلاقة :

$$\rho = \frac{e[\epsilon - eA_0]}{Mc^2} \Psi^* \Psi$$

اذ كان $\epsilon = E > eA_0$ تكون لإشارة الكثافة اشارة الشحنة e نفسها أما عندما يكون الكمون كبيراً $eA_0 > E$ ، فتخالف اشارة الكثافة اشارة الشحنة e أي يجب أن نتخلى عن فكرة الجسيم المستقل في المكان الذي يكون فيه الحقل قوياً • ولتوضيح استخدام المعادلة (49) سندرس حركة جسيم معدوم السبن ذي شحنة سالبة في حقل نواة الذرة • فاذا أهملنا حجم النواة المحدود ، وجدنا :

$$eA_0 = -\frac{ze^2}{r} \quad ; \quad A = 0$$

فمن أجل $\epsilon = E > 0$ تصبح المعادلة (49) من الشكل

$$[(E + \frac{ze}{r})^2 - M^2 c^4 + \hbar^2 c^2 \quad \nabla^2] \Psi(r) = 0$$

وباستخدام الاحداثيات القطبية الكروية وبالنظر الى الحلول المقابلة الى الاندفاعات الزاوية المهمة فقط فكتب :

$$\Psi(r) = \frac{1}{r} R_l(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \qquad l = 0, 1, 2, \quad (50)$$

يحقق تابع الموضع المعادلة :

$$\left[\frac{d_2}{dr^2} - \frac{l(l+1) - z^2\alpha^2}{r^2} + \frac{2 z \alpha E}{\hbar c r} - \right.$$

$$\left. - \frac{M^2 c^4 - E^2}{\hbar^2 c^2} \right] R_l (r) = 0 \qquad (51)$$

حيث $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$ ويدعى بثابت البنية الدقيقة ، اذا كتبنا

$$\beta^2 = \frac{4 (M^2 c^4 - E^2)}{\hbar^2 c^2} \qquad (52)$$

واستخدمنا المتحول الجديد $\rho = \beta r$ تصبح المعادلة (51) من الشكل :

$$\left[\frac{d_2}{d\rho^2} + \frac{\lambda}{\rho} - \frac{l(l+1) - z^2\alpha^2}{\rho^2} - \frac{1}{4} \right] R_l = 0 \quad (53)$$

حيث

$$\lambda = \frac{2 z \alpha E}{\hbar c \beta} > 0 \qquad (54)$$

وبتعويض $R_l = \rho^{s+1} W(\rho) e^{-\rho/2}$ في المعادلة (53) نتوصل الى معادلة تعطي $W(\rho)$ وهي :

$$\rho \frac{d_2 W}{d\rho^2} + (2s + 2 - \rho) \frac{dW}{d\rho} + (\lambda - s - 1) W = 0 \quad (55)$$

حيث

$$s(s+1)=l(l+1)-z^2\alpha^2 \qquad (56)$$

ان حل المعادلة (55) هو التابع فوق الهندسي

$$w(\rho)=F(-\lambda+s+1\ ,\ 2s+2\ ,\ \rho) \qquad (57)$$

يجب على R_l أن يتناقص عندما $\rho \to \infty$ وهذا يقتضي أن تكون سلسلة القوى في التابع فوق الهندسي (57) عبارة عن كثير حدود محدود ، ولكي يتحقق ذلك يجب أن يكون :

$$\lambda-s-1=\nu=0,1,2,$$

أو

$$\lambda=\nu+s+1$$

بحل المعادلة (56) واختيار الجذر

$$s=-\frac{1}{2}+\sqrt{(l+\frac{1}{2})^2-z^2\alpha^2} \qquad (58)$$

الذي يضمن بقاء λ موجباً ، نجد :

$$\lambda=\nu+\frac{1}{2}+\sqrt{(l+\frac{1}{2})^2-z^2\alpha^2} \quad ; \quad \nu\ \ l=0,1,2, \qquad (59)$$

وباستخدام المعادلتين (52) , (54) نجد بعد التخلص من β :

$$E=\frac{Mc^2}{\sqrt{1+z^2\alpha^2\lambda^{-2}}} \qquad (60)$$

ان ثابت البنية الدقيقة α صغير وبالتالي يكون العامل $z\alpha$ صغيراً بالمقارنة مع

أبعاد الذرة ، فتبديل (59) بـ (60) ثم النشر وفق قوى $z\alpha$ نجد :

$$E = MC^2 [1 - \frac{Z^2 \alpha^2}{2n^2} - \frac{Z^4 \alpha^4}{2n^4} (\frac{n}{l + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4}) + \dots] \quad (61)$$

حيث $n = \nu + l + 1$ هـو العـدد الكمومي الرئيسي • بتعويض (61) في (52) نجـد

$$\beta = \frac{2ZMe^2}{n\hbar^2} \quad \text{من أجـل} \quad Z\alpha << 1$$

يمثل الحد الأول في المعادلة (61) الطاقـة السكونية للجسيم ، أما الحـد الثانـي :

$$-\frac{M^2 C^2 Z^2 \alpha^2}{2n^2} = \frac{-MZ^2 e^4}{2n^2 \hbar^2} = E_n^0$$

فهو طاقة جسيم كتلة M في حقـل كولوني محسوب بطريقـة غـير نسبويـة ، والحد الثالث :

$$\Delta E_{nl} = \frac{E_n^0 Z^2 \alpha^2}{n} [\frac{3}{4n} - \frac{1}{l + \frac{1}{2}}] \quad (63)$$

يعطي التصحيح النسبوي للطاقة ويرتبط بالعدد الكمومي l مؤدياً الـى ازالـة الانطباق في التقريب غير النسبوي •

★ ★ ★

مسائل

١ ـ أوجد منطلقاً من معادلة كلاين ـ غوردن ، معادلة الانحفاظ

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla j = 0$$

٢ ـ أثبت مستخدماً المصفوفات

$$\tau_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \; ; \; \tau_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \; ; \; \tau_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \; , \; I = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

أن معادلة كلاين غوردن ترد الى المعادلة $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi$ حيث : $\Psi = \begin{bmatrix} \Phi \\ x \end{bmatrix}$

$$\Phi = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\Psi - \frac{\hbar}{mc}\frac{\partial \Psi}{\partial x_4}\right) \; ; \; x = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\Psi + \frac{\hbar}{mc}\frac{\partial \Psi}{\partial x_4}\right)$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}(\tau_3 + i\tau_2)\nabla^2 + mc^2\tau_3$$

٣ ـ أثبت أن معادلة الحركة لجسيم مشحون عديم السبن ضمن حقل كهرطيسي توصف في الميكانيك الكمومي النسبوي بالعلاقة :

$$\left(\Box - k^2 + \frac{e^2 A_0^2}{\hbar^2 c^2} - 2\frac{ie}{\hbar^2} A_0 \frac{\partial}{\partial t}\right)\Psi(r,t) = 0$$

★ ★ ★

الفصل الثالث

النظرية الكمومية لجمل الجسيمات المتماثلة

النظرية الكمومية للجمل المؤلفة من جسيمات متماثلة

١ ـ معادلة شرودينغر لجملة مؤلفة من جسيمات متماثلة :

سندرس الآن تعميم النتائج ، المقابلة لحركة جسيم واحد ضمن حقل خارجي ، في حالة جسيمات متعددة • عندما تتكون الجملة من N جسيماً ، يرتبط التفاعل بين الجسيمات وبين الحقل الخارجي بكامل التاريخ السابق للجملة وليس بوضع الجسيمات في لحظة ما ، وذلك عند ادخال أثر الاعاقة بعين الاعتبار ، فاذا كانت السرعات النسبية للجسيمات صغيرة بالمقارنة مع سرعة الضوء ، فان التوزع الموضعي (التشكيل) للجسيمات يتغير قليلاً خلال الزمن اللازم لانتقال التفاعل ، ونستطيع في هذه الحالة كتابة التابع الهاميلتوني الكلاسيكي كتابع لاحداثيات واندفاعات جميع الجسيمات في الجملة حتى المرتبة $(v/c)^2$ ، أما اذا كانت سرعات الجسيمات من مرتبة سرعة الضوء ،عندها يجب أن نأخذ الحقل الذي ينقل التفاعل بعين الاعتبار اضافة الى احداثيات الجسيمات واندفاعاتها ، ويكون للجملة عدد لا نهائي من درجات الحرية •

سنبدأ بدراسة جملة نستطيع فيها استخدام التقريب غير النسبوي ، فنكتب مؤثر هاميلتون بالشكل :

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} \frac{\hat{p}_i^2}{2m_i} + \hat{V}(r_1, r_2, \ldots) + \hat{W}, \qquad (1)$$

حيث $\hat{V}$ هو مؤثر الطاقةالكامنة للتفاعل بين الجسيمات وهو تابع لإحداثيات الجسيمات جميعاً • والمقدار $\hat{W}$ هو مؤثر التفاعل بين الاندفاع المداري والسبن،

أي هو التفاعل بين سبينات الجسيمات وبين جزء الطاقة الكامنة المرتبط باندفاعات الجسيمات والذي يأخذ بعين الاعتبار أثر تفاعلات الاعاقة بصورة جزئية ، فهو تابع لمؤثرات السبن ولاندفاعات هذه الجسيمات ويكون عادة من المرتبة $(v/c)^2$ ويحسب باستخدام نظرية الاضطراب •

وتأخذ معادلة شرودينغر الصيغة :

$$(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H})\Psi = 0 \qquad (2)$$

حيث $\hat{H}$ هو مؤثر هاميلتون المعين بالعلاقة (1) • يكون التابع الموجي Ψ مرتبطاً بالزمن والسبن واحداثيات الموضع للجسيمات أو هو تابع للزمن والسبن والاندفاعات وذلك حسب اختيار طريقة التمثيل •

فإذا كانت جميع الجسيمات في الجملة متماثلة $(m = m_i \ , i = 1,\ldots,N)$ أي غير متمايزة ، عندها يكون مؤثر هاميلتون $\hat{H}$ صامداً لدى تبديل جسمين من الاجسام في الجملة • نرمز الى مؤثر التبديل الذي يغير رقمي الجسيمين k و l بالرمز $\hat{P}_{kl}$ ، ويعبر عن شرط تماثل الجسيمات في الجملة بضرورة كون مؤثر هاميلتون $\hat{H}$ تبادلياً مع مؤثر التبديل أي :

$$\hat{P}_{kl}\hat{H} = \hat{H}_{kl}\hat{P} \qquad (3)$$

وبما أن المؤثرين $\hat{H}$ و $\hat{P}_{kl}$ تبادليان مع بعضهما فان القيم الذاتية للمؤثر $\hat{P}_{kl}$ هي من ثوابت الحركة •

ولتعيين التوابع الذاتية والقيم الذاتية للمؤثر $\hat{P}_{1,2}$ والذي يبدل موضعي الجسيمين 1 , 2 ، تنظر الى جملة مؤلفة من جسيمين متماثلين • عندها يجب

على التوابع الموجية أن تحقق المعادلة :

$$\hat{P}_{1,2} \Psi (1,2) = \lambda \Psi (1,2) \qquad (4)$$

حيث λ هي قيمة ذاتية حقيقية لأن المؤثر $\hat{P}_{1,2}$ هرميتي • فاذا طبقنا على المعادلة (4) مؤثر التبديل مرة أخرى نجد :

$$\hat{P}^2_{1,2} \Psi (1,2) = \lambda^2 \Psi (1,2) \qquad (5)$$

ومن جهة أخرى ، وانطلاقاً من تعريف مؤثر التبديل لدينا :

$$\hat{P}_{1,2} \Psi (1,2) = \Psi (2,1)$$

وكذلك $\hat{P}^2_{1,2} \Psi (1,2) = \Psi (1,2)$ • باستخدام هذه النتيجة في المعادلة (5) : نجد : $\lambda^2 = 1$ أو $\lambda = \mp 1$

أي أن لمؤثر التبديل $\hat{P}_{1,2}$ قيمتين ذاتيتين فقط هما ∓ 1 • يدعى التابع الذاتي $\Psi_s (1,2)$ المقابل للقيمة الذاتية $\lambda = 1$ بالتابع المتناظر ويعرّف بالعلاقة :

$$\hat{P}_{1,2} \Psi_s (1,2) = \Psi_s (1,2) \qquad (6)$$

كما يدعى التابع الذاتي $\Psi_a (1,2)$ المقابل للقيمة الذاتية $\lambda = -1$ بالتابع ذي التناظر المضاد ويعرف بالعلاقة :

$$\hat{P}_{1,2} \Psi_a (1,2) = - \Psi_a (1,2)$$

وتظهر التجارب على أن الجملة المؤلفة من الكترونين ، أو بروتونين أو نترونين توصف في جميع حالاتها بتوابع ذات تناظر مضاد ، بينما توصف الجملة

المؤلفــة من جزيئتين من جزيئات α بتابع متناظر • أي أن خاصة التناظر بالنسبة لتبديل جسيمين هي احدى ثوابت الحركة ــ لأن المؤثرين $\hat{P}_{1,2}$, $\hat{H}$ تبادليــان ــ وتتعين هذه الخاصة بنوع الجسيمات المشكلة للجملة •

يمكننا تعميم ماسبق ليشمل جمــل مؤلفة من عــدد اختياري من الجسيمات المتماثلة • فبسبب التماثل يجب أن يكون للتابع الموجي الذي يصف الجملة خواص تناظرية (إما تناظر أو تناظر مضاد) بالنسبة لتبديل مواضع أي زوج من جسيماتها• لا تتغير الخواص التناظرية للتابع الموجي بواسطة مؤثر اضطراب خارجي لأن المؤثر الخارجي متناظر بالنسبة لاضطراب أي زوج من الجسيمات بسبب تماثل الجسيمات، فتبعاً لطبيعة الجسيمات توصف حالات الجملة المكونة من جسيمات متماثلة بتوابع موجية متناظرة أو بتوابع موجية ذات تناظر مضاد •

توصف حالات الجمل المؤلفة من الكترونات ، أو بروتونات ، أو ترونات أو أي جسيمات بسيطة كانت أم مركبة بتوابع موجية ذات تناظر مضاد اذا كــان لهــا سبين مساوٍ عدداً فردياً من أنصاف $\hbar$ ($\frac{1}{2}\hbar, \frac{3}{2}\hbar, \frac{5}{2}\hbar, \ldots$) •

كما توصف جمل الجسيمات مركبة كانت أم بسيطة بتوابع موجية متناظــرة اذا كان لهــا سبين معدوم أو مساوٍ عــدداً صحيحاً من $\hbar$ ($0, \hbar, 2\hbar, 3\hbar, \ldots$) .

هاتان القاعدتان هما قاعدتان تجريبيتان تؤكدان على المسلمة الأساسية وهي عــدم تمايز الجسيمات المتماثلة • تدعى الجسيمات المشكلة لجملة توصف بتوابــع موجية متناظرة بالبوزونات كما تدعى الجسيمات المشكلة لجملة توصف بتوابــع موجيــة ذات تناظر مضاد بالفرميونات • وان جميــع الجسيمات الموجودة في الطبيعة تكون إما بوزونات أو فرميونات •

وارتباطاً بمبدأ عــدم التمايز للجسيمات المتماثلة يجب أن يتم تعريف مبــدأ تراكب الحالات بدقــة • إذ أنــه ليس ضروريــاً أن يصف أي مجموع خطــي

لحلول اختيارية ، من حلول معادلة شرودينغر لجملة من الجسيمات المتماثلة ، حالة هذه الجملة • تتعين الحالات الممكنة للجملة بالمجموع الخطي للتوابع التي لا تغير الخواص التناظرية نتيجة تبديل أي زوج من الجسيمات • فمثلاً تقبل التوابع ذات التناظر المضاد في المجموع الخطي اذا كنا نتعامل مع جملة من الالكترونات •

٢ ـ التوابع الموجية المتناظرة والتوابع الموجية ذات التناظر المضاد :

لمعادلة شرودينغر (2) حلول عامة متناظرة وأخرى ذات تناظر مضاد، فحينما نتعامل مع جملة من الفرميونات يجب علينا أن نختار الحلول العامة ذات التناظر المضاد ، كما يجب اختيار الحلول المتناظرة حين التعامل مع جملة من البوزونات، ولسوف نوضح كيفية اختيار الحلول حسب الخواص التناظرية المطلوبة •

لنفترض أن لدينا جملة مؤلفة من جسيمين وأن $\Psi(1,2)$ هو أحد حلول المعادلة (2) • فبسبب تماثل الجسيمين نستطيع تشكيل التابع $\Psi(2,1)$ بتبديل رقمي الجسيمين (1) , (2) في التابع $\Psi(1,2)$ ونحصل على حل آخر للمعادلة (2) ، ونستطيع بسهولة ويسر أن نميز الحل الذي يتمتع بالتناظر المطلوب • فبغض النظر عن معامل التنظيم سيكون للتابع المتناظر Ψ_s وللتابع ذي التناظر المضاد Ψ_a الشكلان :

$$\Psi_s = B[\Psi(1,2) + \Psi(2,1)]$$

$$\Psi_a = A[\Psi(1,2) - \Psi(2,1)]$$

يمكننا تعميم عملية التنظير والتنظير المضاد الى حالة جملة مؤلفة من N جسيماً ، وفي هذه الحالة يكون لدينا !N من التباديل الممكنة ونستطيع أن نتوصل للتابع المقابل لأحد هذه التباديل من التابع $\Psi(1,2,3,\ldots,N)$ بالتبديل المتتابع لأزواج الجسيمات • ليكن $\hat{P}_\nu \Psi(1,2,\ldots,N)$ هو التابع الذي نحصل

عليه من التابع $\Psi(1,2,\ldots,N)$ بعد ν عملية تبديل متتابعة لأزواج الجسيمات. عندها نحصل على التابع المتناظر وعلى التابع ذي التناظر المضاد بالعلاقتين :

$$\psi_s = A \sum_{\nu} \hat{P}_{\nu} \psi(1, 2, \ldots, N), \qquad (7)$$

$$\psi_a = B \sum_{\nu} (-1)^{\nu} \hat{P}_{\nu} \psi(1, 2, \ldots, N), \qquad (8)$$

حيث يتم الجمع من أجل جميع الـ $N!$ تابعاً ، المقابلة للتباديل المختلفة الممكنة لـ N جسيماً في هذه الجملة .

تعترض الحل التام لمسألة الاجسام المتعددة في الميكانيك الكمومي صعوبات رياضية كبيرة ، ومع ذلك فانه يوجد عدد كبير من الحالات ،نستطيع فيها التعرف على الخواص الاساسية للجمل الكمومية باستخدام طريقة التقريب المتتالي تفترض فيها استقلال الجسيمات عن بعضها في التقريب الصفري ، ونأخذ التفاعل بين الجسيمات بعين الاعتبار في التقريب الأعلى من خلال نظرية الاضطراب .

يأخذ مؤثر هاميلتون لجملة الجسيمات في التقريب الصفري صيغة مجموع المؤثرات الهاميلتونية لكل جسيم أي :

$$\hat{H}_0 = \sum_{l=1}^{N} \hat{H}(l).$$

ويمكن كتابة التوابع الذاتية للمؤثر $\hat{H}_0$ على شكل جداء أو مجموع خطي لجداءات التوابع الذاتية للمؤثرات $\hat{H}(l)$. بينما تكون القيم الذاتية للمؤثر $\hat{H}_0$ مساوية مجموع القيم الذاتية للمؤثرات $\hat{H}(l)$. لنفترض أن التابع $\varphi_{n_l}(l)$ هو حل للمعادلة $[\hat{H}(l) - \varepsilon_{n_l}]\varphi_{n_l}(l) = 0$ حيث تشير الأدلة n_l

الى مجموعة الأعـداد الكمومية المميزة لحالة الجسيم l • ان التوابع الذاتيـة للمؤثر $\hat{H}_0$ والمقابلة للقيمة الذاتية $E = \Sigma_l \, \varepsilon_{nl}$ ، ستكون على شكل مجموع خطي للتوابع $\varphi_{n_1}(1) \; ; \; \varphi_{n_2}(2) \; ; \; \ldots \, , \; \varphi_{n_N}(N)$ •فمن أجل جملة من البوزونات يجب أن يكون التابع الموجي الذي يصف هذه الجملة متناظراً

$$\varphi_s = A \sum_{\nu} \hat{P}_\nu \varphi_{n_1}(1) \, \varphi_{n_2}(2) \ldots \varphi_{n_N}(N),$$

حيث A هو معامل التنظيم • أما في حالة جملة من الفيرميونات فيجب أن يكون للتابع الموجي تناظر مضاد أي :

$$\varphi_a = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\nu} (-1)^\nu \hat{P}_\nu \varphi_{n_1}(1) \, \varphi_{n_2}(2) \ldots \varphi_{n_N}(N).$$

نستطيع كتابة التابع الموجي ذي التناظر المضاد على شكل معين يدعى معـين سلاتر ويأخذ الشكل :

$$\Psi_a = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_{n_1}(1) & \varphi_{n_1}(2) & \ldots & \varphi_{n_1}(N) \\ \varphi_{n_2}(1) & \varphi_{n_2}(2) & \ldots & \varphi_{n_2}(N) \\ \varphi_{n_N}(1) & \varphi_{n_N}(2) & \ldots & \varphi_{n_N}(N) \end{vmatrix} \quad (10)$$

ان تغير اشارة التابع (10) نتيجة تبديل رقمي جسيمين ، محقق لأن اشارة المعين تتغير عنـد تبديل موضع زوج من أعمدته • ويمكننا انطلاقاً من العلاقة (10) التوصل الى مبدأ باولي • فاستناداً الى هذا المبدأ لا يمكن أن يصف التابع (10) حالة جملة من الفيرميونات المتماثلة تحوي جسيمين لهما الحالة الكمومية نفسها • فاذا كان بين الحالات الافرادية $n_1 \; ; n_2 \; , \ldots \; ; n_N$ اثنتان متماثلتان انعدم معين

سلاتر . لهـذا ، فمن المستحيل أن يتواجـد في جمـلة من الفيرميونات المتماثلـة جسيمان أو أكثر للحالة الكمومية نفسها . وبالطبع يطبق مبدأ باولي بهذه الطريقة من أجل جمل يكون فيها التفاعل بين الجسيمات ضعيفاً وبالتالي نستطيع التحدث عن حالات لجسيمات منفصلة ولو بطريقة تقريبية . وبصورة عامة نستطيع القول ان الجملة تحقق مبدأ باولي اذا أمكن وصفها بتوابع موجية ذات تناظر مضاد بالنسبة لعملية تبديل أزواج الجسيمات . وعلى الرغم من كون العلاقة (10) مميزة لحالة جملة تكون فيهـا الجسيمات في حالات منفصلة $n_1 , n_2 , \ldots ; n_N$ الا أنه من المستحيل تحديد الجسيم الموجود في كل حالة .

يكتب مؤثر هاميلتون لجملة الجسيمات المتماثلة بالعلاقة :

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^{N} \hat{p}_i^2 + V(r_1, r_2, \ldots, r_N),$$

وهي لاتتضمن مؤثرات السبن للجسيمات في التقريب غير النسبوي وبغياب الحقل المغناطيسي الخارجي . لذلك يمكن كتابـة التابع الموجي للجملة على شكل جـداء لتابع الموضع Φ وتابع السبن χ كما يلي :

$$\Psi(r_1 s_1 , r_2 s_2 , \ldots) = \Phi(r_1 , r_2 , \ldots)\chi(s_1 , s_2 , \ldots) \quad (11)$$

أو على شكل مجموع خطي لمثل هذا الجداء . ويستخدم هذا التابع كتقريب أول من أجل دراسة جملة يحتوي مؤثر هاميلتون الممثل لهـا ، تفاعلاً بـين الاندفـاع المداري والسبن .

تشير ضرورة تناظر التوابع الموجية بالنسبة الى تبديل أرقام الجسيمات الـى كون التوابع الموجيـة توابع تامة ، لأن تبديـل أرقام الجسيمات يـؤدي الـى اضطراب في متحولات الموضع والسبن ، فاذا كان التابع Ψ على شـكل جـداء لتوابع الموضع بتوابع السبن أو على شكل مجموع خطي لمثل هـذه الجـداءات ، عندها نستطيع تأمين تناظر التابع (11) بتشكيلات مختلفة لكـل مـن Φ و χ

وهي ذات تناظر مختلف عند تبديل الاحداثيات الملائمة • ولدراسة هذه الاحتمالات نستخدم مخططات يونغ •

يرمز كل مخطط من مخططات يونغ الى نـوع محدد تماماً من أنواع التناظر، وتتعين مخططات يونغ لتابع الموضع Φ الذي يحوي N متحولاً $r_1 , r_2 , \ldots , r_N$ بتقسيم العدد N بكل الطرق الممكنة وفق مجموع حدود من الشكل :

$$N = N_1 + N_2 + N_3 + \ldots$$

يمكننا توضيح هذا التقسيم بوضع N مربعاً في سطور يحـوي كل منها N_1 و N_2 .. مربعاً وفق ترتيب تناقصي • يمكننـا مثلاً تقسيم العـدد $N = 4$ وفق خمس طرائق :

$$4 = 3 + 1 = 2 + 2 = 2 + 1 + 1 = 1 + 1 + 1 + 1$$

وتأخذ مخططات يونغ المقابلة الاشكال التالية :

(12)

وللتعبير عن مخططات يونغ نستخدم أحياناً أقواساً مربعة يكتب ضمنها عـدد المربعات في كل سطر من المخطط ، ففي الحالة $N = 4$ نكتب :

[4] , [3 , 1] , [2 , 2] , [2 , 1 , 1] , [1 , 1 , 1 , 1]

ونحصل على توابع موجية مقابلة لمخطط محدد من مخططات يونـغ بالتنظير بالنسبة للمتحولات الموجودة في السطر نفسه، وبالتنظير المضاد بالنسبة للمتحولات الموجودة في العمود نفسه مبتدئين دوماً بالعمود الاول •

يرمز المخطط [4] الى تابع متناظر كلياً ، ويرمز المخطط [1, 1, 1, 1] الى تابع ذي تناظر مضاد كلياً ، وترمز المخططات الباقية الى توابع ذات تناظر مختلط. تأخذ المتحولات في تابع السبن قيمتين فقط هما $s = \mp 1/2$ ، فلا يمكن للتابع x أن يملك تناظراً مضاداً بالنسبة لأكثر من متحولين . وبتعبير آخر يقابل التابع x مخططات لها سطران على الاكثر . يمكن مثلاً لتابع السبن الموجي لجملة مؤلفة من أربعة جسيمات أن يقابل المخططات التالية فقط .

(13)

تشير الأسهم ضمن المربعات الى قيمة متحول السبن .

تصف التوابع الموجية لجملة من الجسيمات سبين كل منها $(\frac{1}{2})$ والمقابلة لمخطط ما حالات يكون فيها السبن الكلي s (في واحدات $\hbar$) للجملة محدداً تماماً. فالمخططات (13) مثلاً تصف على الترتيب من اليسار نحو اليمين حالات لها سبن كلي يساوي 0 , 1 , 2 . يصف المخططان لتوابع السبن الموجية من أجل جملة مؤلفة من ثلاثة جسيمات لها السبن $(1/2)$ الحالتين الممكنتين بسبين كلي قدرهما $1/2$, $3/2$ على الترتيب . كما يصف المخططان ، لجملة مؤلفة من جسيمين لكل منهما سبين قدره $(1/2)$ ، الحالتين $s = 0$, $s = 1$ على الترتيب .

ترتبط مخططات يونغ لتوابع السبن بالسبن الكلي للجملة . يصف كل مخطط $(2s + 1)$ حالة سبينية مختلفة ، تختلف عن بعضها بمركبة السبن الكلي وفق المحور OZ .

فإذا رمزنا للتابعين الموجيين لحالتي السبن الممكنتين لجسيم سبينه $(1/2)$

بالرمزين α ، β أمكننا كتابة تابع السبن المقابل للمخطط والممثل للحالة $s = 0$ بالشكل :

$$x_a (1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1)] \qquad (14)$$

وتكون التوابع المقابلة للمخطط ذي السبن $s = 1$ بالشكل :

$$x_{s_1} (1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\alpha(1)\beta(2) + \alpha(2)\beta(1)]$$

$$x_{s_2} (1,2) = \alpha(1)\alpha(2) \qquad (15)$$

$$x_{s_3} (1,2) = \beta(1)\beta(2)$$

يمكن ، من أجل كل حالة سبن للجملة المؤلفة من N جسيماً ، أي من أجل كل مخطط مقابل لتابع السبن x ، أن نجد مخططاً ملائماً لتابع الموضع Φ بشكل يكون فيه للتابع الكلي تناظر مضاد بالنسبة لتبديل متحولات السبن ومتحولات الموضع في وقت واحد . فإذا كانت الجملة مؤلفة من أربعة جسيمات مثلاً وكان تابع السبن x هو المقابل للمخطط [4] ، فيجب ضرب هذا التابع بتابع الموضع المقابل للمخطط [1, 1, 1, 1] . وبصورة عامة يكون التابع الكلي Ψ ذا تناظر مضاد ، اذا ضرب تابع السبن المقابل لجميع المخططات الممكنة بتابع الموضع المقابل الى منقول ذلك المخطط . ففي حالة جملة مؤلفة من أربعة جسيمات ، توجد ثلاثة توابع ممكنة ذات تناظر مضاد هي :

$\Psi_2 = \Phi$ (Young diagram: one column of 4 boxes) $\times$ (Young diagram: one row of spin boxes)

$\Psi_1 = \Phi$ (Young diagram) $\times$ (Young diagram)

$\Psi_0 = \Phi$ (Young diagram: 2×2 boxes) $\times$ (Young diagram)

ويشير دليل التابع Ψ الى قيمة السبن الكلي للحالة ٠

اذا حوت الجملة جسيمات سبينها $\frac{1}{2} < s$ (نصف عدد فردي) يكون لتابع السبن الموجي ($2s + 1$) سطر على الأكثر ولا يتعين السبن الكلي في هذه الحالة بصورة وحيدة وفق مخططات يونغ ٠ وتكون التوابع الموجية للجمـل المؤلفـة من جسيمات ذات سبين صحيح ، متناظرة وتوصف بجداء توابع الموضع وتوابع السبن التي لها المخطط نفسه أو أي مجموع خطي لمثل هذه الجداءات ٠

٣ ـ النظرية الابتدائية للحالة الاساسية لذرة ذات الكترونين :

سندرس الآن حالات الطاقة لجملة مؤلفـة من الكترونين يتحركان في الحقل الكولوني لنواة شحنتها ze ٠ مثل ذرة الهليوم ، فهي تتألف من الكترونين ونواة عددها الذري $z = 2$ ، وذرة الليتيوم المؤينة (بانتزاع أحد الكتروناتها الثلاثة)، وذرة البيريليوم (بعد نزع الكترونين من الكتروناتها الاربعة)،وكذلك كل الذرات المشابهة للهليوم بعد نزع عدد من الكتروناتها ٠

باهمال التفاعل بين الاندفاع الزاوي المداري والسبن ، نكتب مؤثر هاميلتون لمثل هذه الجملة بالشكل :

$$\hat{H} = \hat{H}_0\,(1,2) + \hat{V}_{12} \qquad (16)$$

حيث :

$$H_0(1,2) = -\frac{\hbar^2}{2\mu}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - ze^2\left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right)$$

هو مؤثرهاميلتون لالكترونين في الحقــل الكولوني للنــواة • و $V_{12} = \frac{e^2}{r_{12}}$

هو مؤثر التفاعل بين الالكترونين •

في التقريب الصفري ــ عندما نهمل التفاعل بين الالكترونين ــ نعــالج مسالة كل منهما كحركة الالكترون في الحقل الكولوني للنواة $-\frac{ze^2}{r}$ • تتحدد طاقــة كل منهما بالعلاقة :

$$\varepsilon_n = \frac{ze^2}{2a_0 n^2}$$

حيث $a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$ هو نصف قطر بور ، و n هو العدد الكمومي الرئيس ، وتعطى التوابع الموجية المقابلة لسويات الطاقة ε_n بالعلاقة :

$$\varphi_{n,lm} = R_{nl}(r)\, Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

حيث

$$R_{nl}(r) = -\left\{\left(\frac{2Z}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}\right\}^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2}\rho}\rho^l L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$$

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} \qquad \rho = \frac{2Z}{na_0}r$$

وتعطى كثيرات حدود لاغيير (Laguerre) بالعلاقة :

$$L_{n+l}^{2l+1}(\rho) = \sum_{k=0}^{n-l-1} (-1)^{k+2l+1} \frac{[(n+l)!]^2 \rho^k}{(n-l-1-k)!(2l+1+k)!k!}$$

كما تعطى التوابع التوافقية الكروية بالعلاقة :

$$Y_{lm}(\theta,\varphi)) = \in [\frac{2(l+1)}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}]^{1/2} P_l^m(\cos\theta) e^{im\varphi}$$

حيث $\in = (-1)^m$ من أجل $m > 0$ و $\in = 1$ من أجل $0 \leqslant m$
أما كثيرات حدود ليجندر فتعطى بالعلاقة :

$$P_l(x) = \frac{1}{l!2^l} \frac{d^l}{dx^l} [(x^2-1)^l]$$

ويكون :

$$P_l^m(x) = (1-x^2)^{|\frac{m}{2}|} \frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}} P_l(x)$$

ونجد في الجدول التالي صيغاً صريحة لبعض التوابع الأولى :

$$R_{10}(r) = (\frac{z}{a_0})^{3/2} \; 2 \, e^{-\frac{zr}{a_0}}$$

$$R_{20}(r) = (\frac{z}{2a_0})^{3/2} \; (2 - \frac{zr}{a_0}) \, e^{-\frac{zr}{2a_0}}$$

$$R_{21}(r) = (\frac{z}{2a_0})^{3/2} \; \frac{zr}{a_0\sqrt{3}} \, e^{-\frac{zr}{2a_0}}$$

$$Y_{0,0}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$$

$$Y_{1,0}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta$$

$$Y_{1,\pm 1}(\theta,\varphi) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta\, e^{\pm i\varphi}$$

$$Y_{2,0}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3\cos^2\theta - 1)$$

$$Y_{2,\pm 1}(\theta,\varphi) = \mp \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \sin\theta \cos\theta\, e^{\pm i\varphi}$$

$$Y_{2,\pm 2}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2\theta\, e^{\pm i\varphi}$$

تكون الحالة الأساسية لجملة الكترونين في التقريب الصفري مماثلة لكون الالكترونين في الحالة $1s$ بطاقة قدرها :

$$E_0 = 2\varepsilon_1 = -\frac{z^2 e^2}{a_0} \qquad (17)$$

وتابعها الموجي هو :

$$\Psi_0 = \varphi_{1s}(1)\, \varphi_{1s}(2) = \frac{1}{\pi}\left(\frac{z}{a_0}\right)^3 \exp\left[-\frac{z}{a_0}(r_1 + r_2)\right] \qquad (18)$$

وهو تابع متناظر بالنسبة لتبديل رقمي الالكترونين ، وللحصول على تابع ذي تناظر مضاد يجب أن نضرب التابع (18) بتابع موجي للسبين ذي تناظر مضاد $\chi_a(1,2)$

لهذين الالكترونين ويقابل المخطط $\boxed{\begin{array}{c}\uparrow\\ \hline \downarrow\end{array}}$ الذي يصف الحالة ذات السبن المعدوم.

نحصل بتطبيق نظرية الاضطراب من المرتبة الاولى على طاقة الحالة الاساسية

$$E = E_0 + Q \qquad (19)$$

حيث :

$$Q = \int \varphi^2_{1s}(1) \frac{e}{r_{12}} \varphi^2_{1s}(2)\, d_3 r_1\, d_3 r_2 \qquad (20)$$

هو متوسط الطاقة للتفاعل الكولوني بين الالكترونين في الحالة (18) ولحساب هذا التكامل يفضل نشر المقدار $\frac{1}{r_{12}}$ بدلالة التوابع التوافقية الكروية :

$$\frac{1}{r_{12}} = \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \begin{cases} \dfrac{4\pi}{r_1} \sum\limits_{l,m} \dfrac{1}{2l+1} \left(\dfrac{r_2}{r_1}\right)^l Y^*_{lm}(\theta_1\varphi_1)\, Y_{lm}(\theta_2\varphi_2), & \text{if} \quad r_1 > r_2; \\ \dfrac{4\pi}{r_2} \sum\limits_{l,m} \dfrac{1}{2l+1} \left(\dfrac{r_1}{r_2}\right)^l Y^*_{lm}(\theta_1\varphi_1)\, Y_{lm}(\theta_2\varphi_2), & \text{if} \quad r_2 > r_1. \end{cases}$$

حيث θ_1 ، φ_1 هما الزاويتان القطبيتان للشعاع $\mathbf{r}_1$ و θ_2 و φ_2 هما الزاويتان القطبيتان للشعاع $\mathbf{r}_2$. اذا عوضنا هذا النشر وكذلك العلاقة (18) في العلاقة (20) متذكرين أن التابع (18) لا يتعلق بالمتحولات الزاوية فان جميع الحدود باستثناء $l = m = 0$ ستتلاشى عند المكاملة على المتحولات الزاوية ونجد :

$$Q = \frac{4e^2}{\pi}\left(\frac{Z}{a}\right)^6 \int_0^\infty e^{-2Zr_1/a}\left[\frac{1}{r_1}\int_0^{r_1} e^{-2Zr_2/a} r_2^2\, dr_2 + \int_{r_1}^\infty e^{-2Zr_2/a} r_2\, dr_2\right] r_1^2\, dr_1$$

نكامل بالتجزئة فنجد :

$$Q = \frac{5 z e^2}{8 a_0} \qquad (21)$$

وتكون طاقة الحالة الاساسية لجملة الالكترونين باستخدام نظرية الاضطراب من المرتبة الاولى

$$E = -\frac{z e^2}{a_0} (z - \frac{5}{8}) \qquad (22)$$

لنحسب الآن طاقة التأيين لذرة الهليوم وكذلك للأيونات الشبيهة بها • ان طاقة التأيين J ، وهي الطاقة اللازمة لنزع الكترون واحد من الذرة ، تساوي الفرق بين طاقة الالكترون المتبقي في حقل الشحنة $(- \frac{z e^2}{2 a_0})$ والطاقة المحسوبة بالعلاقة (22) أي :

$$J = \frac{z e^2}{a_0} (z - \frac{5}{8}) - \frac{z e^2}{2 a_0} = \frac{z e^2}{2 a_0} (z - \frac{5}{4}) \qquad (23)$$

يمكننا أن نتوصل الى قيمة أدق للطاقة وللتابع الموجي في الحالة الاساسية لجملة الكترونين بتطبيق طريقة المتغيرات • ففي الحالة الأساسية يكون للالكترونين اندفاع زاوي معدوم ويكون سبيناهما متعاكسين • نستطيع اختيار تابعنا التجريبي كما في العلاقة (18) ونستبدل بالشحنة z معامل متغير β فنجد :

$$\Psi_0 = \frac{1}{\pi} (\frac{\beta}{a_0})^3 \exp [- \frac{\beta (r_1 + r_2)}{a_0}] \qquad (24)$$

وتعود مسألة تعيين طاقة الحالة الاساسية الى حساب التكامل :

$$E(\beta) = \int \Psi_0 \hat{H} \Psi_0 \, d_3 r_1 \, d_3 r_2$$

حيث $\hat{H}$ هو مؤثر هاميلتون المعرف بالعلاقة (16) • بتعويض الصيغة الصريحة لـ $\hat{H}$ في $E(\beta)$ وباستخدام العلاقة $\frac{\hbar^2}{\mu} = a_0 e^2$ نستطيع كتابة $E(\beta)$ على شكل مجموع لثلاثة حدود :

$$E(\beta) = E_1(\beta) + E_2(\beta) + E_3(\beta)$$

حيث :

$$E_1(\beta) = -\frac{1}{2} a_0 e^2 \int \Psi_0 (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) \Psi_0 \, d_3 r_1 \, d_3 r_2 = \beta^2 \frac{e^2}{a_0}$$

$$E_2(\beta) = -z e^2 \int \Psi_0^2 \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right) d_3 r_1 \, d_3 r_2 = -2 z \beta \frac{e^2}{a_0}$$

$$E_3(\beta) = e^2 \int \Psi_0^2 \frac{1}{r_{12}} \, d_3 r_1 \, d_3 r_2 = \frac{5}{8} \beta \frac{e^2}{a_0}$$

ونحصل على طاقة الجملة كتابع للمعامل β

$$E(\beta) = \frac{e^2}{a_0} \left[\beta^2 - \left(2z - \frac{5}{8}\right)\beta\right]$$

فاذا استخدمنا شرط النهاية الصغرى أي : $\frac{dE}{d\beta} = 0$

$$\beta_0 = z - \frac{5}{16} \qquad (25)$$

ونحصل على طاقة الحالة الاساسية للجملة

$$E = E(\beta_0) = -[z^2 - \frac{5}{8} z + \frac{25}{256}] \frac{e^2}{a_0} \qquad (26)$$

وكذلك نحصل على التابع الموجي

$$\Psi_0 = \frac{1}{\pi} (\frac{z - 5/16}{a_0})^3 \exp\{ - \frac{(z - 5/16)(r_1 + r_2)}{a_0} \} \qquad (27)$$

ويدعى المقدار $z^* = (z - 5/16)$ بالشحنة النووية الفعالة •

يختلف التابع الموجي (27) عن التابع الموجي (18) بأن الشحنة النووية الفعالة تأخذ بعين الاعتبار الحجب الجزئي للالكترون عن النواة بواسطة الالكترونات الاخرى • وباستخدام العلاقة (26) نجد أن طاقة التأيين هي :

$$J = -E_0 - \frac{z e^2}{2 a_0} = \frac{e}{2 a_0} [z^2 - \frac{5}{4} z + \frac{25}{128}] \qquad (28)$$

ندرج في الجدول التالي القيم التجريبية لطاقة التأيين مقرونة بالقيم المحسوبة وفق العلاقتين (23) , (28) مقاسة بالواحدات الذرية •

القيم وفق العلاقة (28)	القيم وفق العلاقة (23)	القيم التجريبية	
0.85	0.75	0.9035	He
2.72	2.62	2.7798	Li^{+}
5.60	5.50	5.6560	Be^{++}
14.35	14.25	14.4070	B^{+++}

ويتضح من هذا الجدول أن طريقة التغيرات البسيطة تعطي نتائج مرضية بالمقارنة مع القيم التجريبية• ولقد استخدم هيليراس تابعاً اختيارياً بعدة معاملات وتوصل الى القيمة $J_0 = 0.9037$ في حالة ذرة الهليوم •

٤ ـ الحالات المثارة لذرة الهليوم : اورثو ـ بارا :

يتوضع الالكترونان في الحالة الاساسية لذرة الهليوم كما في الحالة 1s لشبيهات الهيدروجين ولسوف نستخدم الرمز $(1s)^2$ للتعبير عن هذه الحالة الاساسية ، فنضع حالة الالكترون ضمن القوس ونرمز بالدليل العلوي لعدد الالكترونات في تلك الحالة . يدعى مثل هذا التمثيل بالتشكيل الالكتروني. تقابل الحالة المثارة الاولى في ذرة الهليوم التشكيل (1s)(2s) وتمثل التوابع الموجية المقابلة لهذا التشكيل بالمخططات [مخطط] أو [مخطط] وتكتب كما يلي :

$$\Phi_s = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_{1s}(1)\,\varphi_{2s}(2) + \varphi_{1s}(2)\,\varphi_{2s}(1)]$$

(29)

$$\Phi_a = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_{1s}(1)\,\varphi_{2s}(2) - \varphi_{1s}(2)\,\varphi_{2s}(1)]$$

يجب أن يكون للتابع الموجي تناظر مضادأي يجب أن يقابل التابع Φ_s حالةالسبن المتعاكس ويكون السبن الكلي معدوماً ، بينما يقابل التابع Φ_a حالة السبن المتوازي ويكون السبن الكلي مساوياً الواحد . تدعى الحالات المقابلة للسبن المتعاكس بالحالات من النوع بارا ويكون التابع الموجي للموضع Φ_s . فالحالة الاساسية لذرة الهليوم هي حالة بارا . وتدعى الحالات المقابلة للسبن المتوازي بالحالات من النوع أورثو .

يكون للحالتين بارا وأورثو المقابلتين للتشكيل (1s)(2s) ، في التقريب الصفري ، الطاقة نفسها أما اذا أخذنا التأثير المتبادل بين الالكترونين بعين الاعتبار عندها تختلف الحالتان . وتكون طاقة الحالة بارا أعلى من طاقة الحالة اورثو .

سوف نستخدم نظرية الاضطراب من المرتبة الاولى من أجل ايجاد طاقة الحالتين بارا واورثو ، أي يجب أن نحسب القيمة المتوسطة لمؤثر هاميلتون (16) في هذه الحالات ، متذكرين أن φ_{1s} و φ_{2s} هما التابعان المقابلان للطاقتين ε_{1s} و ε_{2s} لشبيهات الهيدروجين • فمن أجل الحالة بارا نجد :

$$E_s = \int \Phi_s \hat{H} \Phi_s \, d\tau = \varepsilon_{1s} + \varepsilon_{2s} + Q + A \qquad (30)$$

وفي حالة الأورثو لدينا :

$$E_a = \int \Phi_a \hat{H} \Phi_a \, d\tau = \varepsilon_{1s} + \varepsilon_{2s} + Q - A \qquad (31)$$

حيث

$$Q = \int \varphi^2_{1s}(1) \, \varphi^2_{2s}(2) \, \frac{e^2}{r_{12}} \, d_3 r_1 \, d_3 r_2 \qquad (32)$$

$$A = \int \varphi_{1s}(1) \, \varphi_{2s}(2) \, \frac{e^2}{r_{12}} \, \varphi_{1s}(2) \, \varphi_{2s}(1) \, d_3 r_1 \, d_3 r_2 \qquad (33)$$

يدعى التكامل Q بتكامل كولون فهو يعين القيمة المتوسطة لطاقة التفاعل الكولوني بين الالكترونين عند اهمال الارتباط بين حركتي الالكترونين وينتج عن تناظر التوابع • أما التكامل A فيدعى بتكامل التبادل ويحدد جزء الطاقة الكولونية المرتبط بحركة الالكترونين • لحساب التكاملين Q ، A لا بد من تعويض التوابع الموجية :

$$\varphi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-zr/a_0}$$

$$\varphi_{2s} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{z}{a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{zr}{a_0}\right) e^{-zr/2a_0}$$

في العلاقتين (32) , (33) • ان القيم التجريبية لطاقة الحالتـين بارا وأورثو في ذرة الهليوم ذات التشكيل (2s) (1s) هي :

$$E_s = -2.146 \frac{e^2}{a_0} \quad ; \quad E_a = -2.175 \frac{e^2}{a_0}$$

يمكن تقسيم الحالات المثارة المقابلة للتشكيـل (2p) (1s) أيضاً الـى بارا وأورثو والتي تقابل توابع الموضع :

$$\Phi'_s = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_{1s}(1) \varphi_{2p}(2) + \varphi_{1s}(2) \varphi_{2p}(1)]$$

$$(34)$$

$$\Phi'_a = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_{1s}(1) \varphi_{2p}(2) - \varphi_{1s}(2) \varphi_{2p}(1)]$$

والقيم التجريبية لطاقة الحالتين هي :

$$E'_s = -2.124 \frac{e^2}{a_0} \qquad E'_a = -2.133 \frac{e^2}{a_0}$$

يجب لايجاد التوابع الموجية لحالتي بارا وأورثو المقابلتين للتشكيل (2s) (1s) ضرب التوابع (29) بتابع السبن الملائم لذلك نجد :

$$\Psi^{(1)}_{para} = \Phi_s (1,2) \; \chi_a (1,2)$$

حيث تم تعريف التابع $\chi_a (1,2)$ بالعلاقة (14) وبالمثل تتعين الحالة أورثو بالتوابع الموجيـة :

$$\Psi^{(1)}_{ortho} = \Phi_{a}(1,2)\ \chi_{s_1}(1,2)$$

$$\Psi^{(2)}_{ortho} = \Phi_{a}(1,2)\ \chi_{s_2}(1,2)$$

$$\Psi^{(3)}_{ortho} = \Phi_{a}(1,2)\ \chi_{s_3}(1,2)$$

والتي تقابل حالات السبن الثلاث الممكنة ، والتي تختلف عن بعضها بتوجه السبن الكلي (1, 0, 1 −) .

★ ★ ★

مسائل

١ ــ أثبت أن مؤثري التناظر والتناظر المضاد هما مؤثرا اسقاط متعامدة أي يحققان العلاقــة :

$$S^2 = S \quad , \quad A^2 = A \quad , \quad SA = AS = 0$$

٢ ــ أوجد أشعة الحالة لجملة مؤلفة من جسيمين لكل منهما سبين قدره $\frac{1}{2}$ ، بحيث تكون أشعة ذاتية للمؤثرين S^2 , S_z حيث S هو مؤثر السبن الكلــي للجملة . ناقش تناظر أشعة الحالة هذه .

٣ ــ أعد المسألة السابقة بالنسبة لجسمين لكل منهما سبين قدره 1

٤ ــ أثبت أنه اذا كان التابع الموجي لجملة مؤلفة من جسمين عديمي السبن ، هو التابع الذاتي للاندفاع الزاوي المداري للحركة النسبية للجسمين ، عنــدها سيأخذ الاندفاع المداري l قيمة زوجية أو صفراً .

٥ ــ استخدم نتيجة المسألة (٤) لدراسة احتمال التفكك $^{8}_{4}Be \longrightarrow {}^{4}_{2}He + {}^{4}_{2}He$ اذا كان البرميليوم في حالة مثارة ذات عزم زاوي مداري كلي يساوي الواحد.



الفصل الرابع

التكميم الثاني
لجمل البوزونات والفيرميونات

التكميم الثاني لجمل البوزونات والفيرميونات

١ ـ التكميم الثاني للحقل الكهرطيسي في غياب الشحنات الكهربائية :

يجب ألا يتعلق وصف حالة جملة من الجسيمات المتماثلة بترقيم هذه الجسيمات ، ويعبّر عن هذه الخاصة بشكل متناظرٍ للتابع الموجي عند تبديل أي زوج من هذه الجسيمات ، ولقد وجدنا أن حالات جمل البوزونات (جسيمات لها سبين صحيح) توصف بتوابع متناظرة • تتم دراسة مثل هذه الجمل باستخدام تمثيل يدعى بعدد الشغل occupation number ، أو التكميم الثاني ، ويتم في هذا التمثيل اختيار التوابع ذات التناظر المطلوب بصورة ذاتية •

ترتبط التوابع الموجية لجملة مؤلفة من N جسيماً لكل منها σ درجة من الحرية بعدد من المتحولات قدره $N\sigma$ وذلك عند استخدام تمثيل الاحداثيات • بينما نعبر عن المؤثرات في تمثيل التكميم الثاني بدلالة مؤثرات الخلق والإفناء للجسيمات وبذلك نعطي درجة واحدة من الحرية لكل جسيم، وتوصف الجملة بكاملها بتوابع تتعلق بعدد يشير الى عدد الجسيمات في كل حالة ، وينتج من ذلك تسهيل" لدراسة الجمل المؤلفة من عدد كبير من الجسيمات • ولا يوجد طريقة عملية أخرى لدراسة جمل تتغير فيها أعداد الجسيمات ، أي جمل تتحول فيها الجسيمات من نوع الى آخر ، وفي هذه الحالة نستخدم نظرية الحقول ونعد الجسيمات بمثابة كمات لحقل معين • ويكون التفاعل بين الجسيمات على شكل تفاعل بين الحقول المختلفة ، وتعد حقول هذه الجسيمات متحولات ديناميكية، فهي توابع للموضع والزمن، ولكن الاحداثيات في هذه الحالة هي احداثيات نقاط الفراغ وليست احداثيات الجسيمات •

سنستخدم الآن طريقة التكميم الثاني لدراسة مجموعـة من الفوتونات أي كمات الحقل الكهرطيسي • يوصف الحقل الكهرطيسي في النظريـة الكلاسيكية بالتابع اللاغرانجي :

$$L = \frac{1}{8\pi}\left\{\frac{1}{c^2}\left(\frac{\partial A}{\partial t}\right)^2 - (\nabla \times A)^2\right\} \qquad (1)$$

حيث A هو الكمون المتجـه الذي يحقق العلاقة : $\operatorname{div} A = 0$ ، وتعطـى شدة الحقل الكهربائي E والتحريض المغناطيسي B بدلالة A بالعلاقتين :

$$E = -\frac{1}{c}\frac{\partial A}{\partial t} \quad ; \quad B = \vec{\nabla} \times A \qquad (2)$$

وباستخدام العلاقة : $\frac{\partial L}{\partial A} = -\frac{1}{4\pi}\vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times A)$ ، وكذلك بحل معادلة لاغرانـج

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial\left(\frac{\partial A}{\partial t}\right)}\right) - \frac{\partial L}{\partial A} = 0$$

، نحصل من المعادلة (1) على معادلة ماكسويل الأولى :

$$\frac{1}{c}\frac{\partial E}{\partial t} = \vec{\nabla} \times B \qquad (3)$$

أما معادلات ماكسويل الثلاث الباقية فهي :

$$\vec{\nabla} \cdot B = 0 \quad ; \quad \vec{\nabla} \cdot E = 0 \qquad \frac{1}{c}\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = -\vec{\nabla} \times E$$

نحصل من المعادلتين (1) , (3) على معادلة الحركة للكمون المتجه :

$$\frac{\partial_2 A}{\partial t^2} - c^2 \nabla^2 A = 0 \qquad (4$$

ويتعين الاندفاع المعمم P المرافق للكمون المتجه A وفق العلاقة (1) بالعلاقة:

$$\mathbf{P} = \frac{\partial L}{\partial\left(\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}\right)} = \frac{1}{4\pi c^2}\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = -\frac{1}{4\pi c}\mathbf{E} \qquad (5)$$

وبناءً عليه يكتب تابع هاميلتون بدلالة الكمون المتجه والاندفاع المعمم للحقل الكهرطيسي بالعلاقة :

$$H = -\int \left\{ 2\pi c^2 \mathbf{P}^2 + \frac{1}{8\pi}(\nabla \times \mathbf{A})^2 \right\} d_3 \mathbf{r} \qquad (6)$$

سنفترض أن الحقل الكهرطيسي محصور ضمن حجم كبير V على شكل مكعب ضلعه $V^{1/3}$ ويحقق الشروط الحدية الدورية بدور قدره $V^{1/3}$ عندها تكتب تحويلات فورييه لكل من الكمون المتجه والاندفاع المعمم بالعلاقتين :

$$A(r,t) = V^{-1/2} \sum_{Q,\alpha} e_\alpha(Q) A_{Q\alpha}(t)\, e^{i(Q\cdot r)}, \quad A_{Q\alpha} = A^*_{-Q,\alpha}, \qquad (7)$$

$$P(r,t) = V^{-1/2} \sum_{Q,\alpha} e_\alpha(Q) P_{Q\alpha}(t)\, e^{-i(Q\cdot r)}, \quad P_{Q\alpha} = P^*_{-Q,\alpha}, \qquad (8)$$

وتأخذ مركبات الشعاع الموجي Q سلسلة لانهائية من القيم المتقطعة

$$Q_l = 2\pi V^{-1/3} \nu_l \quad ; \quad l = 1, 2, 3 \quad ; \quad \nu_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

أما الشعاع $e_\alpha(Q)$ فهو شعاع الوحدة للاستقطاب ويحقق الشروط

$$(Q\cdot e_\alpha(Q)) = 0 \quad ; \quad (e_\alpha(Q)\cdot e_\beta(Q)) = \delta_{\alpha\beta} \quad ; \quad \alpha,\beta = 1,2 \qquad (9)$$

يحقق الكمون المتجه (7) المعادلة (4) ، لذلك فإن $A_{Q,\alpha}(t)$ تتغير بصورة توافقية مع الزمن

$$A_{Q\alpha}(t) = A_{Q\alpha}(0)\, e^{-i\omega_Q t} \;;\quad \omega_Q^2 = c^2 Q^2 \qquad (10)$$

يتم الانتقال من الحالة الكلاسيكية الى الحالة الكمومية باستبدال بـ $P_{Q\alpha}$ و $A_{Q\alpha}$ المؤثرات التبادلية التالية :

$$[\hat{A}_{Q\alpha}(t)\,,\,\hat{P}_{Q'\alpha'}(t)] = i\hbar\,\delta_{QQ'}\,\delta_{\alpha\alpha'} \qquad (11)$$

ويعبر عن هذه المؤثرات ، في تمثيل التكميم الثاني ، بدلالة مؤثراتالبوزون $\hat{a}^{+}_{Q\alpha}$ و $\hat{a}_{Q\alpha}$ من أجل خلق وافناء اثارات ابتدائية للحقل ذات شعاع موجي Q واستقطاب e_α ونعرفها بالعلاقتين :

$$\left.\begin{aligned} \hat{A}_{Q\alpha}(t) &= \left(\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_Q}\right)^{1/2} [\hat{a}_{Q\alpha}(t) + \hat{a}^{+}_{-Q\alpha}(t)] \\ \hat{P}_{Q\alpha}(t) &= i\left(\frac{\hbar\,\omega_Q}{8\pi c^2}\right)^{1/2} [\hat{a}^{+}_{Q\alpha}(t) - \hat{a}_{-Q\alpha}(t)] \end{aligned}\right\} \qquad (12)$$

حيث :

$$\left.\begin{aligned} [\hat{a}_{Q\alpha}(t)\,,\,\hat{a}^{+}_{Q'\alpha'}(t)]_{-} &= \delta_{QQ'}\,\delta_{\alpha\alpha'} \;; \\ [\hat{a}_{Q\alpha}(t)\,,\,\hat{a}_{Q'\alpha'}(t)]_{-} &= 0 \\ [\hat{a}^{+}_{Q\alpha}(t)\,,\,\hat{a}^{+}_{Q'\alpha'}(t)]_{-} &= 0 \end{aligned}\right\} \qquad (13)$$

نحصل باستخدام هذه التحويلات من المعادلة (7) والمعادلة (8) على مؤثر الكمون الشعاعي ومؤثر الاندفاع المرافق ، بدلالة مؤثرات الخلق والإفناء للفوتونات :

$$\left.\begin{aligned} \hat{A}(r,t) &= \sum_{Q,\alpha}\left(\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega_Q}\right)^{1/2} e^{i(Q\cdot r)}\, e_\alpha(Q)[\hat{a}_{Q\alpha}(t) + \hat{a}^\dagger_{-Q,\alpha}(t)], \\ \hat{P}(r,t) &= i\sum_{Q,\alpha}\left(\frac{\hbar\omega_Q}{8\pi c^2 V}\right)^{1/2} e^{-i(Q\cdot r)}\, e_\alpha(Q)[\hat{a}^\dagger_{Q\alpha}(t) - \hat{a}_{-Q,\alpha}(t)]. \end{aligned}\right\} \quad (14)$$

بتعويض المؤثرات (14) في المعادلة (6) وبالمكاملة على الحجم V واستخدام العلاقات :

$$\int e^{i([Q - Q']\cdot r)}\, d_3r = V\,\delta_{QQ'}$$

$$[Q \Lambda e_\alpha(Q)] \cdot [Q \Lambda e_\beta(Q)] = Q^2\,\delta_{\alpha\beta}$$

نحصل على مؤثر هاميلتون للحقل الكهرطيسي في تمثيل التكميم الثاني :

$$\hat{H} = \sum_{Q,\alpha} \hbar\omega_Q(\hat{a}^\dagger_{Q\alpha}\hat{a}_{Q\alpha} + \tfrac{1}{2}) \quad (15)$$

وينتج عن العلاقة (15) ، أنه في تمثيل هايزنبرغ ، يعطى المؤثر المرتبط بالزمن $\hat{a}_{Q\alpha}$ بالعلاقة :

$$i\hbar\frac{d\,\hat{a}_{Q\alpha}}{dt} = [\,\hat{a}_{Q\alpha}\,,\,\hat{H}\,]_- = \hbar\omega_Q\,\hat{a}_{Q\alpha}$$

أو

$$\hat{a}_{Q\alpha}(t) = \hat{a}_{Q\alpha}(0)\, e^{-i\omega_Q t}$$

نحصل بتعويض المؤثرات (14) في المعادلة (2) على مؤثرات شـدة الحقـل الكهربائي والتحريض المغناطيسي :

$$\hat{E} = i \sum_{Q,\alpha} \left(\frac{2\pi\hbar\omega_Q}{V}\right)^{1/2} e_\alpha(Q)\, e^{i(Q\cdot r)} (\hat{a}_{Q\alpha} - \hat{a}^{\dagger}_{-Q,\alpha}),$$
$$\hat{B} = i \sum_{Q,\alpha} \left(\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega_Q}\right)^{1/2} [Q \wedge e_\alpha(Q)]\, e^{i(Q\cdot r)} (\hat{a}_{Q\alpha} - \hat{a}^{\dagger}_{-Q,\alpha}). \quad (16)$$

لنحسب الآن مؤثر الاندفاع الكلي في الحقـل ، إن كثافة الاندفاع ، وفـق النظرية الكلاسيكية ، تساوي شعاع بوينتنغ مقسماً على c^2 ، فيكون الاندفاع الكلي في واحدة الحجم

$$\hat{P} = (4\pi c^2 V)^{-1} [E \wedge B]\, d_2 r$$

وباستخدام المؤثرات (16) نجد :

$$\hat{P} = \sum_{Q,\alpha} \hbar Q (\hat{a}^{\dagger}_{Q\alpha}\hat{a}_{Q\alpha} + \tfrac{1}{2}).$$

وبسبب وجـود شعاعٍ $-Q$ مقابلٍ لكل شعاع Q ، في المجموع أعلاه يكون

$$\hat{P} = \sum_{Q,\alpha} \hbar Q \hat{a}^{\dagger}_{Q\alpha}\hat{a}_{Q\alpha}. \quad (17)$$

إن مؤثر الطاقة (15) ومؤثر الاندفاع (17) قطريـان في تمثيل التكميم الثاني ، فهما يحويان المؤثرات $\hat{a}_{Q\alpha}$ $\hat{a}^{+}_{Q\alpha}$ فقط • ففي الحالات التي تحـوي عدداً محدوداً من الجسيمات $| n_{Q\alpha} >$ تعطى الطاقة والاندفاع بالصيغتين :

$$E = \sum_{Q,\alpha} \hbar\omega_Q (n_{Q\alpha} + \tfrac{1}{2}), \quad \mathscr{P} = \sum_{Q,\alpha} \hbar Q n_{Q\alpha}.$$

أي أن تكميم الحقل الكهرطيسي يعني اثارات ابتدائية ، فوتونات ، طاقتهـا $\hbar\omega_Q$ واندفاعها $\hbar Q$ واستقطابها $e_\alpha(Q)$ • إن طاقة حالة الفراغ ، أي حالة بدون فوتونات هي $E_0 = \frac{1}{2}\sum_Q \hbar\omega_Q = \infty,$ ، لأن عدد الحالات الممكنة لانهائي • أما في الظواهر الفيزيائية فإننا نهتم بفروق الطاقــة وبالتالي نستطيع مقارنة طاقة الحقــل •

إن الانتقال من المقــادير الكلاسيكية A ، E ، B التــي تصف الحقــل الكهرطيسي الى المؤثرات ، يدعى بتكميم الحقل ومثل هذا التكميم يدعى بالتكميم الثاني ، ويكون الانتقال من المقادير الكلاسيكية الى المؤثرات الكمومية لمرةواحدة، وتلعب احداثيات A , B , E دور المعاملات وليست احداثيات الجسيم •

تكون الفوتونات ، المقابلة لحالة كمومية معينة ، متماثلة ويعطى التابع الموجي الممثل لحالة n فوتوناً من نوع واحد بالعلاقة :

$$|n> = (n!)^{-1/2} (\hat{a}^+)^n |0> \qquad (18)$$

وهو تابع متناظر بالنسبة لتبديل الفوتونات لأنها بوزونات ، وتتحرك الفوتونات دوماً بسرعــة الضوء وتكون كتلتها السكونية معدومــة دوماً • نستطيع باستخــدام العلاقتين (13) , (14) التوصل الى العلاقات المستمرة لمركبات مؤثر الكمون المتجه عند نقاط مختلفة ولكن في اللحظة نفسها نجد :

$$[\hat{A}_l(\mathbf{r},t) \; , \; \hat{A}_k(\mathbf{r}',t)]_- = 0 \quad ;$$

$$(19)$$

$$[\hat{A}_l(\mathbf{r},t) \; , \; \frac{\partial \hat{A}(\mathbf{r}',t)}{\partial t}] = 4\pi i\hbar c^2 \, \delta_{lk} \, \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$$

حيث $(l, k = x, y, z)$

ونستطيع بسهولة حساب علاقات التبادل لمركبات شدة الحقل ،

$$[\hat{E}_k(\mathbf{r},t) , \hat{E}_l(\mathbf{r}',t)]_- = [\hat{B}_k(\mathbf{r},t) , \hat{B}_l(\mathbf{r}',t)]_- = 0 \quad (20)$$

كما تتبادل المركبات المتوازية لكل من فنجد :

$$[\hat{E}_k(\mathbf{r},t) , \hat{B}_k(\mathbf{r}',t)]_- = 0 \quad (21)$$

بينما تكون المركبات المتعامدة لشدة الحقل الكهربائي والتحريض المغناطيسي غير تبادلية

$$[\hat{E}_x(\mathbf{r},t) , \hat{B}_y(\mathbf{r},t)]_- = 4\pi i \hbar c \frac{\partial}{\partial t} \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \quad (22)$$

ونحصل على العلاقات الأخرى بتبديل دوري للمركبات • ويتضح من العلاقات التبادلية للمركبات عدم إمكانية تحديد المركبات المتعامدة من E و B باللحظة نفسها في النقطة نفسها من الفراغ •

٢ ـ التكميم الثاني لحقل الميزونات★ :

تظهر التجارب وجوب بيونات مشحونة وأخرى معتدلة ، ويمكن للبيونات المشحونة أن تملك شحنة موجبة أو سالبة وتكون كتلتها أكبر من كتلة الالكترون بـ 273 مرة ، بينماتكون كتلة البيونات المعتدلة أكبر من كتلة الالكترون بـ 264 مرة ، ويكون للبيون سبين معدوم وله زوجية سالبة •

لقد ذكرنا أنه من المستحيل ، في النظرية النسبوية ، الحفاظ على وصف يستند الى حركة الجسيم الوحيد ، ولكي تتمكن من وصف حالات الجمل ذات الأعداد

★ انظر ملحق تصنيف الجسيمات الاولية .

المتغيرة من الجسيمات ، يجب أن تتحول الى الوصف الحقلي الـــذي تظهر فيـــه الجسيمات على شكل كمات للحقل •

تقابل البيونات المشحونة حقلاً $\Psi(r)$ حقيقياً • ويكون المتحول الديناميكي للحقل تابعاً سلمياً كاذباً لاحداثيات الموضع والزمن • ففي الوصف الحقلي يلعب الإحداثي r دور احداثي الموضع وليس احداثي الجسيم ، لذلك لن تعترضنـــا صعوبـــة استخدام فكرة احداثيات الجسيم في النظرية النسبوية •

لننظر الى الحقل السلمي العقدي لجسيم كتلته M ، يجب على التابع $\Psi(r)$ أن يحقق معادلة كلاين ـــ غوردن

$$\left[\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + \frac{M^2 c^4}{\hbar^2} \right] \Psi = 0 \qquad (23)$$

تصف هذه المعادلة الحركة الحرة ، وتقابل البيونات غير المتفاعلة ، ولكـــي نتمكن من وصف التفاعل يجب علينا أن نستخدم حقلاً آخر يقوم بنقل التفاعل • تعطى كثافة الشحنة الكهربائية وكثافة التيار بالعلاقتين

$$\rho = \frac{i e \hbar}{2 M c^2} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right) \; ; \quad j = \frac{e \hbar}{2 M i} \left(\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^* \right) \qquad (24)$$

وتشكل شعاعا رباعي الأبعاد ، كما أن الحقل العقدي Ψ الذي يحقق المعادلة (23) يقابل كثافة اللاغرانجي :

$$L = \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \frac{\partial \Psi}{\partial t} - c^2 \left(\vec{\nabla} \Psi^* \cdot \vec{\nabla} \Psi \right) - \frac{M^2 c^4}{\hbar^2} \Psi^* \Psi$$

ويكون لاحداثيي الحقل Ψ و Ψ^* الاندفاعان المرافقان قانونياً :

$$\pi = \frac{\partial L}{\partial \left(\frac{\partial \Psi}{\partial t} \right)} = \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \quad , \quad \pi^* = \frac{\partial \Psi}{\partial t} \qquad (25)$$

فتكون كثافة الهاميلتوني :

$$H = c^2 (\nabla \Psi^* \cdot \nabla \Psi) + \frac{M^2 c^4}{\hbar^2} \Psi^* \Psi + \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

ولتكميم الحقل يجب استبدال بالمتحول الديناميكي Ψ واندفاعه المرافق $\pi = \frac{\partial \Psi^*}{\partial t}$ المؤثرات الملائمة التي تحقق العلاقات التبادلية التالية :

$$[\hat{\Psi} (r't) , \hat{\Psi}^+ (r,t)]_- = [\hat{\Psi} (r',t) , \frac{\partial \Psi (r,t)}{\partial t}]_- =$$

$$= [\frac{\partial \Psi (r,'t)}{\partial t} , \frac{\partial \hat{\Psi}^+ (r,t)}{\partial t}]_- = 0$$

$$[\hat{\Psi} (r't) , \Psi (r,t)] = [\frac{\partial \hat{\Psi} (r't)}{\partial t} , \frac{\partial \hat{\Psi} (r,t)}{\partial t}]_- = 0$$

$$(27)$$

$$[\Psi (r',t) , \frac{\partial \hat{\Psi}^+ (r,t)}{\partial t}]_- = i \hbar \delta (r' - r)$$

نحصل بالتبديل في المعادلة (26) وبالتكامل على كل الفراغ على مؤثر هاميلتون الهرميتي للحقل :

$$\hat{H} = \int [\frac{\partial \hat{\Psi}^+}{\partial t} \frac{\partial \Psi}{\partial t} + c^2 (\vec{\nabla} \hat{\Psi}^+ \cdot \vec{\nabla} \Psi) + \frac{M^2 c^4}{\hbar^2} \hat{\Psi}^+ \Psi] d_3 r \qquad (28)$$

ولكي ننتقل لتمثيل التكميم الثاني ، نعرّف مجموعة التوابع المتعامدة ،وهي حلول المعادلة (23) • ونأخذ الحلول المقابلة لقيمة محددة من قيم الاندفاع $\hbar k$ فنجد حلين مستقلين لكل قيمة •

$$\varphi_1 = \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{i[(k \cdot r) - \omega_k t]} \quad ;$$

$$\varphi_2 = \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{i[(k \cdot r) + \omega_k t]} \qquad (29)$$

حيث

$$\omega_k = c \sqrt{k^2 + \frac{M^2 c^4}{\hbar^2}}$$

ولتبسيط الرموز نستخدم شروطاً حدية دورية بدور كبير L فنجد

$$k_i = \frac{2\pi n_i}{L} \quad \text{حيث} \quad i = 1, 2, 3 \quad ; \quad n_i = 0, \mp 1, \mp 2, \ldots$$

سوف ننشر مؤثرات الحقل $\hat{\Psi}$, $\frac{\partial \Psi}{\partial t}$ بدلالة مجموعة تامة من التوابع (29) فنجد :

$$\hat{\varphi} = \sum_k \sqrt{\frac{\hbar}{2V\omega_k}} [\hat{a}_k e^{-i\omega_k t} + \hat{a}^{\dagger}_{-k} e^{i\omega_k t}] e^{i(k.r)},$$
$$\frac{\partial \hat{\varphi}}{\partial t} = -i \sum_k \sqrt{\frac{\hbar \omega_k}{2V}} [\hat{a}_k e^{-i\omega_k t} - \hat{a}^{\dagger}_{-k} e^{i\omega_k t}] e^{i(k.r)}. \qquad (30)$$

حيث $V = L^3$

نجد بتعويض المعادلات (30) في العلاقات التبادلية (27) أنها محققة إذا كانت المؤثرات الجديدة تحقق العلاقات التبادلية البوزونية :

$$\left.\begin{aligned} &[\hat{a}_{k}, \hat{a}^{+}_{k'}]_{-} = [\hat{b}_{k}, \hat{b}^{+}_{k'}]_{-} = \delta_{kk'} \\ &[\hat{a}_{k}, \hat{a}_{k'}]_{-} = [\hat{b}_{k}, \hat{b}_{k'}]_{-} = [\hat{a}_{k}, \hat{b}^{+}_{k}]_{-} = 0 \end{aligned}\right] \quad (31)$$

بتعويض العلاقة (30) في العلاقة (28) واستخدام العلاقات (31) نحصل على مؤثر هاميلتون للحقل في تمثيل التكميم الثاني :

$$\hat{H} = \sum_{k} \hbar\omega_{k}[\hat{a}^{+}_{k}\hat{a}_{k} + \hat{b}^{+}_{k}\hat{b}_{k} + 1]. \quad (32)$$

بتعويض القيم (30) في المعادلة (24) ثم المكاملة على كل الحجم نحصل على مؤثر الشحنة الكهربائية الكلية للحقل :

$$\hat{Q} = \int \hat{\varrho}\, d^{3}r = e \sum_{k} [\hat{a}^{+}_{k}\hat{a}_{k} - \hat{b}^{+}_{k}\hat{b}_{k}]. \quad (33)$$

فإذا عرّفنا عدد الجسيمات بالمؤثرات

$$n^{(+)}_{k} = \hat{a}^{+}_{k}\,\hat{a}_{k} \quad \text{و} \quad n^{(-)}_{k} = \hat{b}^{+}_{k}\,\hat{b}_{k}$$

وهما مؤثران تبادليان مع مؤثر هاميلتون (32) ومع مؤثر الشحنة (33)، نستطيع وصف الحالات المستقرة بالتوابع الموجية :

$$|\, n^{(+)}_{k} \ldots n^{(-)}_{k} \ldots \rangle = \frac{(\hat{a}^{+})^{n^{(+)}_{k}}}{(n^{(+)}_{k}\,!)^{1/2}} \ldots \frac{(\hat{b}^{+})^{n^{(-)}_{k}}}{(n^{(-)}_{k}\,!)^{1/2}} \ldots |0\rangle \quad (34)$$

سنستنتج من المعادلتي (33) ، (32) أن التابع الموجي $|\, n^{(+)}_{k} \rangle$ يقابل حالة فيها $n^{(+)}_{k}$ جسيماً يملك كل منها اندفاعاً قدره $\hbar k$ وشحنة قدرها $Q = e\, n^{(+)}_{k}$

وطاقة قدرها $n_k^{(+)} \hbar\omega_k$ • بينما يقابل التابع الموجي < $n_k^{(-)}$ ا حالة فيها $n_k^{(-)}$ جسيماً يملك كل منها اندفاعاً قدره $\hbar k$ وشحنة تساوي $Q = -en_k^{(-)}$ وطاقة قدرها $n_k^{(-)} \hbar\omega_k$ • تقود الحالات المكممة لحقل الميزونات المشحونة الى كمات حقلية (جسيمات) تأخذ شحنة موجبة أو سالبة • إن القيم الذاتية لمؤثر هاميلتون (32) موجبة دوماً بينما تكون القيم الذاتية لمؤثر الشحنة الكهربائية للحقل موجبة أوسالبة تبعاً لعدد الجسيمات المشحونة ايجاباً وعدد الجسيمات المشحونة سلباً • توصف حالات جملة البيونات ، استناداً الى علاقات التبادل (31) بالتوابع (34) • وهي توابع متناظرة بالنسبة لتبديل أزواج الجسيمات فالبيونات هي بوزونات تخضع لقوانين بوزه ــ اينشتاين الاحصائية •

توصف الميزونات المعتدلة بحقل حقيقي فالمؤثر (30) يستطيع أن يصف الجسيمات المعتدلة إذا وضعنا

$$\hat{\Psi}(r) = \hat{\Psi}^{+}(r) \qquad (35)$$

عندها يرتبط المؤثران $\hat{b}_k$, $\hat{a}_k$ بالعلاقة :

$$\hat{b}_k = \hat{a}_{-k} \qquad (36)$$

أي أن مؤثرات حقل الميزون المعتدل توصف بشكل وحيد بدلالة مؤثرات الخلق $\hat{a}_k^{+}$ ومؤثرات الإفناء $\hat{a}_k$ كما يلي :

$$\begin{aligned} \hat{\varphi} &= \sum_k \sqrt{\frac{\hbar}{2\mathcal{V}\omega_k}} [\hat{a}_k e^{-i\omega_k t} + \hat{b}_k^{+} e^{i\omega_k t}] e^{i(k.r)}, \\ \frac{\partial\hat{\varphi}}{\partial t} &= -i\sum_k \sqrt{\frac{\hbar\omega_k}{2\mathcal{V}}} [\hat{a}_k e^{-i\omega_k t} - \hat{b}_k^{+} e^{i\omega_k t}] e^{i(k.r)}. \end{aligned} \qquad (37)$$

وتحقق هذه المؤثرات العلاقات التبادلية :

$$[\hat{\Psi}, \hat{\Psi}]_- = [\frac{\partial\hat{\Psi}}{\partial t}, \frac{\partial\hat{\Psi}}{\partial t}]_- = 0 \quad ;$$

$$[\hat{\Psi}(r,t), \frac{\partial\Psi(r,t)}{\partial t}]_- = i\hbar\,\delta(r' - r)$$

فإذا حقق المؤثران $\hat{a}_k$, $\hat{a}_k^+$ علاقات التبادل

$$[\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}]_- = [\hat{a}_k^+, \hat{a}_{k'}^+]_- = 0 \quad ; \quad [a_k, \hat{a}_{k'}^+]_- = \delta_{kk'}$$

وعوضنا العلاقتين (37) في (28) نحصل على مؤثر هاميلتون لحقل الميزونات المعتدلة

$$\hat{H} = \sum_k \hbar\omega_k[\hat{a}_k^\dagger\hat{a}_k + \tfrac{1}{2}].$$

ويتلاشى مؤثر الشحنة الكهربائية الكلية في الحقل المعتدل .

$$\hat{Q} = e\sum_k[\hat{a}_k^\dagger\hat{a}_k - \hat{a}_{-k}^\dagger\hat{a}_{-k}] = 0.$$

٣ ـ التكميم الثاني لجمل من الفيرميونات غير المتفاعلة :

توصف الجمل المكونة من فيرميونات متماثلة بتوابع موجية ذات تناظر بالنسبة لتبديل موضعي فيرميونين منها . ويتحقق مبدأ باولي عندما نتحدث عن تقريب لحالة الجملة يكون فيه لكل فيرميون حالة منفصلة ولايسمح لفرميونين أن يكون لهما الحالة نفسها . سوف نبدأ دراسة جملة الفيرميونات المتماثلة بأبسط حالة لجملة تحوي N فيرميوناً غير متفاعلة مع بعضها ، وهي في أخفض طاقة لها بحيث لايمكن أن يتشكل في الجملة جسيم مضاد .

سنفترض أن حالة الفيرميون المنفصل (في حقل خارجي متولد بواسطة جسيمات أخرى مثل نوى الذرات) تتعين بمؤثر هاميلتون $\hat{H}(\xi)$ حيث تعبر ξ عن احداثيات الموضع والسبن • كما سنفترض أن ϵ_s و $\varphi_s(\xi)$ هما القيمة الذاتية والتابع الذاتي للمؤثر $\hat{H}(\xi)$ • يميز الدليل s جميع الأعداد الكمومية المعينة لحالة الجسيم الوحيد • ففي التمثيل الاحداثي يكتب مؤثر هاميلتون كمايلي:

$$\hat{\mathcal{H}}(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) = \sum_{i=1}^{N} \hat{H}(\xi_i). \qquad (40)$$

ويكون التابع الموجي فيهذا التمثيل $\Psi(\xi_1, \dots, \xi_N)$ ذا تناظر مضاد ويتضمن $4N$ متحولاً لأن ξ_i تعبر عن الموضع والسبن للجسيم •

تتحدد حالة الجملة في تمثيل التكميم الثاني بعدد الجسيمات في كل حالة من حالات الجسيم الوحيد • لنفترض أن عدد الجسيمات في الحالة S هو :

$$n_s = \hat{\alpha}_s^+ \hat{\alpha}_s \qquad (41)$$

ولكي يصف المؤثر (41) حالات جملة الفيرميونات يجب أن لايكون له أكثر من قيمتين ذاتيتين هما : $0 , 1$ وذلك وفق مبدأ باولي ، ونعبر عن المؤثر الهرميتي $\hat{n}_s$ بالمصفوفة القطرية :

$$\hat{n}_s = \hat{\alpha}_s^+ \hat{\alpha}_s = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad (42$$

ويعطى التابعان الذاتيان للمؤثر (42) ، المقابلان للقيمتين الذاتيتين $0 , 1$

$$|0> = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} , \quad |1> = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad (43)$$

لنفترض أن المؤثر $\hat{\alpha}_s$ يخفض من عدد الجسيمات الموجودة في الحالة S

بمقدار جسيم واحد أي :

$$\hat{\alpha}_s |0> = 0 \quad ; \quad \hat{\alpha}_s |1> = |0> \qquad (44)$$

فتكون المصفوفة غير الهرميتية المقابلة للمؤثر $\hat{\alpha}_s$ وتلك المقابلة للمؤثر $\hat{\alpha}_s^+$

$$\hat{\alpha}_s = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad ; \quad \hat{\alpha}_s^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad (45)$$

ويحقق المؤثر $\hat{\alpha}_s^+$ العلاقات :

$$\hat{\alpha}_s^+ |0> = |1> \quad , \quad \hat{\alpha}_s^+ |1> = 0 \qquad (46)$$

أي أن المؤثر $\hat{\alpha}_s^+$ يزيد عدد الجسيمات في الحالة s بمقدار جسيم واحدعندما تكون الحالة s خالية ، كما يعدم التابع المقابل لحالة تحوي جسيماً • وباستخدام التعريف (45) يمكننا أن نتوصل الى علاقات التبادل للمؤثرات المذكورة والتي سندعوها بمؤثرات فيرمي :

$$[\hat{\alpha}_s , \hat{\alpha}_s]_+ = [\hat{\alpha}_s^+ , \hat{\alpha}_s^+]_+ = 0 \qquad [\hat{\alpha}_s , \hat{\alpha}_s^+]_+ = 1 \qquad (47)$$

حيث $[\hat{\alpha} , \hat{\beta}]_+ = \hat{\alpha}\hat{\beta} + \hat{\beta}\hat{\alpha}$

لاتتعين المؤثرات $\hat{\alpha}_s$ و $\hat{\alpha}_s^+$ بالمصفوفات (45) بصـورة كاملـة إذ يجب الإشارة الى علاقتهما بالمؤثرين $\hat{\alpha}_{s'}$ و $\hat{\alpha}_{s'}^+$ المقابلة للحالات الأخرى • وكما في البوزونات سنفترض وجود علاقة مثل $[\hat{\alpha}_s , \hat{\alpha}_s]_+ = 0$ من أجل جميع المؤثرات باستثناء $\hat{\alpha}_s$ و $\hat{\alpha}_s^+$ لكل حالـة s حيث $[\hat{\alpha}_s , \hat{\alpha}_s^+]_+ = 1$

وبتعبير آخر سنطلب أن تحقق المؤثرات ... , $\hat{\alpha}_{s'}$, $\hat{\alpha}_s$ العلاقات :

$$[\hat{\alpha}_s , \hat{\alpha}_l]_+ = [\hat{\alpha}_s^+ , \hat{\alpha}_l^+]_+ = 0 \quad , \quad [\hat{\alpha}_s , \hat{\alpha}_l^+]_+ = \delta_{sl} \tag{48}$$

إذا رقمنا حالات الجسيم الوحيد بترتيب معين ورمزنا لعدد الجسيمات بالحالة s بالعدد n_s (ويأخذ القيمتين 0 و 1) ، يمكننا عندها كتابة المؤثرات المحققة للعلاقات (48) في تمثيلٍ تكون فيه المؤثرات $\hat{n}_s$ قطرية أي :

$$\hat{\alpha}_s = (-1)^{\nu_s} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \hat{\alpha}_s^+ = (-1)^{\nu_s} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

حيث ν_s هو عدد الحالات المشغولة التي تسبق الحالة s • يتميز تأثير المؤثرين $\hat{\alpha}_s^+$, $\hat{\alpha}_s$ في التوابع الموجبة $|\, ... \, n_s \, ... >$ (يرتبط هذا التأثير بعدد الجسيمات في كل حالة من الحالات وحيدة الجسيم) بالمعادلتين :

$$\hat{\alpha}_s \, |\, ... \, n_s \, ... > \; = \; (-1)^{\nu_s} \, n_s \, |\, ... \, 1 - n_s \, ... >$$

$$\hat{\alpha}_s^+ \, |\, ... \, n_s \, ... > \; = \; (-1)^{\nu_s} \, (1 - n_s) \, |\, ... \, 1 - n_s \, ... > \tag{50}$$

وكذلك نستطيع استنتاج المعادلات التالية متذكرين أن

$$1 - n_s^2 = 1 - n_s \quad \text{و} \quad n_s^2 = n_s$$

$$\hat{\alpha}_s \hat{\alpha}_s^+ \, |\, ... \, n_s \, ... > \; = (1 - n_s) \, |\, ... \, n_s \, ... >$$

$$\hat{\alpha}_s^+ \hat{\alpha}_s \, |\, ... \, n_s \, ... > \; = n_s \, |\, ... \, n_s \, ... >$$

$$\hat{\alpha}_s \hat{\alpha}_s \mid \dots n_s \dots > = n_s (1 - n_s) \mid \dots n_s \dots > = 0$$

$$\hat{\alpha}_s^+ \hat{\alpha}_s^+ \mid \dots n_s \dots > = 0$$

ومن أجل $l < s$ نجد :

$$\hat{\alpha}_l \hat{\alpha}_s \mid \dots n_l \dots n_s \dots > =$$

$$(-1)^{\nu_s + \nu_l} n_l \; n_s \mid \dots 1 - n_l \dots 1 - n_s \dots >$$

$$\hat{\alpha}_s \hat{\alpha}_l \mid \dots n_l \dots n_s \dots > =$$

$$(-1)^{\nu_s + \nu_l - 1} n_l \; n_s \mid \dots 1 - n_l \dots 1 - n_s \dots >$$

أي أن

$$\hat{\alpha}_l \hat{\alpha}_s \mid \dots n_l \dots n_s \dots > = - \hat{\alpha}_s \hat{\alpha}_l \mid \dots n_l \dots n_s \dots >$$

ترتبط مؤثرات فيرمي بعدد الجسيمات في الحالة s (n_s) وكذلك بالحالات المشغولة التي تليها فالمؤثران $\hat{\alpha}_l$ و $\hat{\alpha}_s$ غير مستقلين تماماً . فـإذا عينت المعادلة $[\hat{H}(\xi) - \varepsilon_s]\varphi_s = 0$ حالات الجسيم الوحيد ، عندها يكتب مؤثر هاميلتون للجملة المؤلفة من فيرميونات مستقلة بالشكل

$$\hat{H} = \int \hat{\Psi}^+(\xi) \; \hat{H}(\xi) \; \hat{\Psi}(\xi) \; d\xi \qquad (51)$$

ونعبر عن مؤثر الحقل $\hat{\Psi}$ بدلالة المؤثرات $\hat{\alpha}_s$ من خلال المعادلة :

$$\hat{\Psi}(\xi, t) = \sum_s \hat{\alpha}_s \varphi_s(\xi) e^{-i\omega_s t}, \quad \omega_s = \frac{\varepsilon_s}{\hbar}. \qquad (52)$$

باستخدام العلاقة (48) وكذلك لأن φ_s تشكل مجموعة تامة من التوابع المتعامدة نستطيع البرهان على أن مؤثرات الحقل تحقق علاقات التبادل :

$$\left.\begin{aligned} [\hat{\Psi}(\xi'), \hat{\Psi}^\dagger(\xi)]_+ &= \sum_{s,t} \varphi_s(\xi') \varphi_t^*(\xi) [\hat{\alpha}_s, \hat{\alpha}_t^\dagger]_+ = \delta(\xi' - \xi), \\ [\hat{\Psi}(\xi'), \hat{\Psi}(\xi)]_+ &= [\hat{\Psi}^\dagger(\xi'), \hat{\Psi}^\dagger(\xi)]_+ = 0. \end{aligned}\right\} \qquad (52)$$

بتعويض المعادلات (52) في (51) نحصل على مؤثر هاميلتون لجملةالفيرميونات:

$$\hat{H} = \sum_s \varepsilon_s \hat{\alpha}_s^\dagger \hat{\alpha}_s = \sum_s \varepsilon_s \hat{n}_s.$$

إن الطاقات ϵ_s والتوابع الموجبة φ_s ماهي الا حالات الالكترون في الذرات أو الجزيئات أو المادة الصلبة ، طالما بقي التفاعل بين الالكترونات مهملاً.

يعطى مؤثر العدد الكلي للجسيمات في الجملة (N) بالعلاقة :

$$\hat{N} = \int \hat{\Psi}^+(\xi) \hat{\Psi}(\xi) \, d\xi$$

كما تعطى كثافة عدد الجسيمات عند النقطة ξ بالتكامل

$$\hat{\rho}(\xi) = \int \hat{\Psi}^+(\xi) \, \delta(\xi - \xi') \, \hat{\Psi}(\xi') \, d\xi'$$

وباستخدام العلاقة (52) نجد :

$$\hat{N} = \sum_s \hat{a}_s^\dagger \hat{a}_s, \quad \hat{\varrho}(\xi) = \sum_{s,s'} \hat{a}_s^\dagger \hat{a}_{s'} \varphi_s(\xi) \varphi_{s'}(\xi). \qquad (53)$$

ونستطيع الحصول على مؤثرات المقادير الفيزيائية المختلفة لجملة الفيرميونات باتباع مايلي : اذا كان المؤثر $\hat{F}$ في التمثيل الاحداثي مؤلفاً من مجموع المؤثرات $\hat{F}(\xi)$ العاملة على احداثيات الالكترونات ، فإنه يكتب في تمثيل التكميم الثاني بالشكل :

$$\hat{F} = \int \hat{\Psi}^{+}(\xi)\, F(\xi)\, \hat{\Psi}(\xi)\, d\xi \tag{54}$$

باستخدام المعادلة (52) نجد :

$$\hat{F} = \sum_{s,l} a_s^{\dagger} a_l \langle s|\hat{F}|l\rangle , \tag{55}$$

حيث $\langle s|\hat{F}|l\rangle = \int \varphi^*_s(\xi)\, \hat{F}(\xi)\, \varphi_l(\xi)\, d\xi$ هي عناصر مصفوفة المؤثر في التمثيل الاحداثي بينما $\varphi_l(\xi)$ هي التوابع الذاتية للمؤثر $\hat{H}(\xi)$.



الفصل الخامس

نظرية الانتقالات الكمومية

The theory of quantum transitions

نظرية الانتقالات الكمومية

١ ــ نظرية الاضطراب التابع للزمن :

لنفترض أن لدينا مؤثراً اضطراب صيغته

$$\hat{V}(t) = \begin{cases} W(t) & 0 \leqslant t \leqslant \tau \\ 0 & t < 0 \ , \ t > \tau \end{cases}$$

يؤثر خلال فترة زمنية محددة ، في جملة مؤثرها الهاميلتـوني مستقل عن الزمن $\hat{H}_0$ • يعطى مؤثر هاميلتون الكلي لهذه الجملـة بالعلاقة $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$ ويكون تابعاً للزمن • كما تعطى معادلة شرودينغر المرتبطة بالزمن ، المقابلة لهـذا المؤثر بالعلاقة

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = [\ \hat{H}_0 + \hat{V}(t)\ ]\ \Psi \qquad (1)$$

يمكن للمؤثر $\hat{V}(t)$ أن يصف التفاعل بين جملة ما وبين أجسام أخـرى ، وفي أبسط الحالات يأتي التفاعل المرتبط بالزمن نتيجة تغير في المعاملات الخارجيةمثل تغير المسافـة أو تغير شدة الحقل الخارجي •• الخ

لتعيين التابع الموجي الذي يحقق المعادلة (1) فكتب التابع Ψ على النحو التالي

$$\psi = \sum a_n(t)\, \varphi_n e^{-iE_n t/\hbar}, \qquad (2)$$

حيث E_n و φ_n هي القيم الذاتية والتوابع الذاتية للمؤثر $\hat{H}_0$ • سنفترض أن

الجملة كانت مستقرة ، قبل تطبيق المؤثر الاضطرابي ، بطاقة قدرها E_m • أي أن التابع الموجي الذي يصف الحالة الابتدائية هو

$$\Psi_{init} = \varphi_m e^{-iE_m t/\hbar}$$

وذلك من أجل $t < 0$ • تصل الجملة ، بعد انتهاء فترة تطبيق المؤثر $t \geqslant \tau$ ، الى حالة جديدة تقابل القيمة $a_{nm}(\tau)$ المرتبطة بمؤثر الاضطراب $\hat{W}(t)$ ، ويكون التابع الموجي الذي يصف الجملة من أجل $t > \tau$

$$\Psi_{fin} = \sum_n a_{nm}(\tau)\, \varphi_n e^{-iE_n t/\hbar}. \qquad (3)$$

يعطى احتمال وجود الجملة في حالة مستقرة طاقتها E_n بمـربع القيمة المطلقـة للأمثال $a_{nm}(\tau)$ أي :

$$w_{nm}(\tau) = |a_{nm}(\tau)|^2 \qquad (4)$$

ويساوي احتمال انتقال الجملة من الحالة الابتدائية m الى الحالة النهائيـة n خلال الفترة الزمنية τ • ولحساب الأمثال a_{nm} نعـوض المعادلة (2) في المعادلة (1) ثم نضربها بـ φ_n^* ونكامل فنحصل على مجموعة المعادلات :

$$i\hbar \frac{d}{dt} a_n(t) = \sum_l \langle n|\hat{W}(t)|l\rangle e^{i\omega_{nl}t} a_l(t), \qquad (5)$$

حيث

$$\langle n|\hat{W}(t)|l\rangle = \int \varphi_n^* W(t)\, \varphi_l \, d\xi \qquad (6)$$

و

$$\hbar\, \omega_{nl} = E_n - E_l$$

سنأخذ بعين الاعتبار في كل مايلي ، الاضطرابات ذات العناصر القطرية المعدومة أي:

$$< n | W t) | n > = 0$$

وفي هذه الحالة لايحوي المجموع (5) حدوداً يكون فيها $n = l$.

يجب لإيجاد احتمالات الانتقال حل المعادلات (5) الخاضعة للشرط الحدي :

$$a_n (0) = \delta_{nm} \tag{8}$$

اذا كانت عناصر المصفوفة (6) صغيرة والفترة الزمنية τ ليست طويلة جداً (بمعنى أن الاختلاف بين قيم الأمثال $a_n(\tau)$ والقيم الابتدائية لها صغير) نستطيع حل المعادلات (5) بطريقة التقريب المتتالي •

ففي التقريب الأول نعين قيمة $a_n (t)$ بتعويض القيم الابتدائية $a_n (0)$ في الطرف الايمن من المعادلة (5) فنحصل على مجموعة المعادلات التالية من أجل $n \neq m$:

$$i\hbar \frac{d a^{(1)}_{nm}}{dt} = < n | \hat{W} (t) | m > e^{i\omega_{nm} t}$$

وباستخدام الشرط (8) نجد :

$$a^{(1)}_{nm} (t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t < n | \hat{W} (t') | m > e^{i\omega_{nm} t'} dt' \tag{9}$$

بتعويض هذه القيمة في الطرف الأيمن من المعادلة (5) نجد قيمة التقريب الثاني:

$$i\hbar \frac{da^{(2)}_{nm}}{dt} = \langle n | \hat{W}(t) | m \rangle e^{i\omega_{nm} t}$$
$$+ \frac{1}{i\hbar} \sum_{n'(\neq m)} \langle n | \hat{W}(t) | n' \rangle e^{i\omega_{nn'}(t)} \int_0^t \langle n' | \hat{W}(t') | m \rangle e^{i\omega_{n'm} t'} dt ,$$

ونكتب حل هذه المعادلة بالشكل :

$$a_{nm}^{(2)}(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \langle n|\hat{W}(t')|m\rangle e^{i\omega_{nm}t'}dt' + \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \sum_{n'(\neq m)}\int_0^t \langle n|\hat{W}(t')|n'\rangle e^{i\omega_{nn'}t'}\int_0^{t'} \langle n'|\hat{W}(t'')|m\rangle e^{i\omega_{n'm}t''}dt''\,dt'. \qquad (10)$$

بتعويض هذه القيمة في الطرف الأيمن من المعادلة (5) نجد قيمة التقريب الثالث وهكذا نتوصل إلى الحل على شكل سلسلة لانهائية تكتب كما يلي

$$a_{nm}(t) = \langle n|\hat{p}\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_0^t \hat{W}(t')\,dt'\right]|m\rangle \qquad (11)$$

حيث :

$$\hat{p}\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_0^t W(t')\,dt'\right] = 1 + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \hat{\tilde{W}}(t')\,dt'$$

$$+\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_0^t \hat{\tilde{W}}(t')\int_0^{t'} \hat{\tilde{W}}(t'')\,dt'\,dt'' \qquad (12)$$

$$+\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^3 \int_0^t \hat{\tilde{W}}(t')\int_0^{t'} \hat{\tilde{W}}(t'')\int_0^{t''} \hat{\tilde{W}}(t''')\,dt'\,dt''\,dt''' + \dots$$

أما $\hat{\tilde{W}}(t)$ فهو مؤثر الاضطراب ويكتب بالشكل :

$$\hat{\tilde{W}}(t) = e^{iH_0t/\hbar}\,\hat{W}(t)\,e^{-iH_0t/\hbar} \qquad (13)$$

تتوقف عادة في كثير من مسائل الفيزياء الذرية والفيزياء النووية عند التقريب الأول أي نعد العلاقة (9) تقريباً كافيا لقيم a_{nm} . ويكون احتمال الانتقال

من الحالة m الى الحالة n خلال فترة تطبيق الاضطراب مساوياً :

$$w_{nm}(\tau) = |a^{(1)}_{nm}(\tau)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t < n|\hat{w}(t)|m > e^{i\omega_{nm}t} dt \right|^2 \quad (14)$$

فنتيجة للانتقالات الكوانتية من الحالة $<|m$ الى حالة مختلفة $<|n$ ، يتناقص احتمال وجود الجملة في الحالة $<|m$ (والذي كان مساوياً الواحد في اللحظة $t = 0$) • فإذا كان هذا التناقص اسياً أي

$$|a_{nm}(t)|^2 = e^{-t/T} \quad (15)$$

فيدعى المقدار T بعمر الحالة $<|m$ • ومن الواضح أن التقريب الأول (14) يصلح عندما تكون فترة تطبيق الاضطراب τ أصغر بكثير من عمر الحالة $<|m$ •

٢ ــ اثارة الذرة بقذفها بجسيم ثقيل :

سنطبق العلاقة (14) في حساب احتمال انتقال الكترون الذرة من الحالة $<|m$ الى الحالة $<|n$ نتيجة التفاعل بين الالكترون وبين جسيم ثقيل مشحون مار بجواره ، وبسبب ثقل الجسيم لن تتغير طبيعة حركته كنتيجةلتفاعله مع الالكترون ،لذلك نفترض أن الجسيم يتحرك بسرعة ثابتة ، ونأخذ مركز احداثيات الجملة منطبقاً على مركز الذرة ، والمحور ox باتجاه حركة الجسيم •

يتعين موضع هذا الجسيم بالشعاع $R(vt, D, 0)$ حيث D هي أقرب مسافة يصل إليها الجسيم من مركز الذرة وتحدث في اللحظة $t = 0$ • فإذا عيّن موضع الالكترون في الذرة بالشعاع $r(x, y, z)$ ، عندها نستطيع كتابة مؤثر التفاعل بين الالكترون والجسيم المشحون كما يلي :

$$\hat{W}(t) = -\frac{ze^2}{|R-r|} \simeq -\frac{ze^2}{R} - \frac{ze^2(xvt + Dy)}{R^3} + \ldots \qquad (16)$$

حيث : $R = \sqrt{(vt)^2 + D^2}$ ، فإذا كان كل من x و y صغيرا بالمقارنة مع R ، نكتفي بالحدين الأولين في العلاقة (16) • لايحتوي الحد الأول في العلاقة (16) على احداثيات الالكترون ويحسب عنصر مصفوفته المعين بالعلاقة (14) كما يلي :

$$< n | \hat{W}(t) | m > = -\frac{ze^2}{R^3}(x_{nm} vt + Dy_{nm}) \qquad (17)$$

حيث

$$x_{nm} = \int \varphi_n^* \; x \, \varphi_m d_3 r \quad , \quad y_{nm} = \int \varphi_n^* \; y \, \varphi_m d_3 r \quad \text{و} \quad \varphi_m , \varphi_n$$

هي التوابع الموجية للحالات المستقرة للالكترون في الذرة •

بتعويض العلاقة (17) في العلاقة (14) وتمديد التكامل من ∞ – الى ∞ + نحصل على صيغة تعطي احتمال انتقال الكترون الذرة من الحالة m الى الحالة n

$$w_{nm} = \frac{z^2 e^4}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} \frac{x_{nm} vt + Dy_{nm}}{[(vt)^2 + D^2]^{3/2}} e^{i\omega_{nm} t} dt \right|^2 \qquad (18)$$

تتناقص قيمة التكامل في المعادلة (18) بشدة مع ازدياد المسافة ، ويكون للتفاعل قيمة ملموسة ضمن نطاق أقرب مسافة يصلها الجسيم من الذرة • لذلك نستطيع الافتراض بأن الزمن الفعلي للتصادم معين بالمقدار $\frac{D}{v}$.

يدعى مثل هذا التصادم بالكظوم إذا كان زمن التصادم الفعلي كبيراً بالمقارنة مع الفترة ω_{nm}^{-1} المميزة للجملة الكمومية ، أي عند تحقق الشرط

$$\omega_{nm} \frac{D}{v} >> 1 \qquad (19)$$

عندما تتحقق هذه المتراجحة تهتز قيمة التكامل في العلاقة (18) مرات عديدة خلال الزمن الفعلي للتصادم وتنعدم تقريباً قيمة التكامل، أي أن الاصطدامات الكظومة لاتكون مصحوبة بإثارة الذرة .

أما إذا تحققت المتراجحة $\omega_{nm} \frac{D}{v} \leqslant 1$ فتكون $e^{i\omega_{nm} t} \simeq 1$ خلال فترة التصادم الفعال ويمكننا بسهولة اجراء التكامل (18) بجعل $\frac{vt}{D} = \tan\theta$ فنجد :

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{x_{nm} vt + Dy_{nm}}{[(vt)^2 + D^2]^{3/2}} dt = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{Dy_{nm}}{[(vt)^2 + D^2]^{3/2}} dt = \frac{2y_{nm}}{vD}$$

ويكون احتمال الانتقال من الحالة m الى الحالة n نتيجة مرور جسيم مشحون على مسافة D من الذرة مساوياً :

$$w_{nm}(D) = \frac{4z^2 e^4 |y_{nm}|^2}{\hbar^2 D^2 v^2}$$

منتبهين أن $D \geqslant a$ حيث a هو نصف قطر الذرة .

اذا كان تدفق الجسيمات ، من خلال واحدة السطوح وخلال واحدة الزمن، هو N ، فيكون احتمال اثارة الذرة خلال واحدة الزمن مساوياً

$$P_{nm} = N \int_0^{v/\omega_{nm}} 2\pi D\, w_{nm}(D)\, dD =$$

$$= \frac{8\pi N e^4 z^2}{\hbar^2 v^2} \mid y_{nm} \mid^2 ln \frac{v}{a\omega_{nm}} \qquad (20)$$

ونستنتج من هذه الصيغة أن احتمال اثارة الذرة يتناقص مع ازدياد سرعة الجسيم طالما اختلفت قيمة $\frac{v}{\omega_{nm}}$ عن نصف قطر الذرة .

عندما تتناقص سرعة الجسيم بحيث تتحقق المتراجحة

$$a\,\omega_{nm}\, v^{-1} \geqslant 1 \qquad (21)$$

تصبح المعادلة (20) غير صحيحة بسبب عدم تحقق المتراجحة $1 \leqslant \omega_{nm}\frac{D}{v}$ ومع ذلك فإن المتراجحة (19) محققة بسبب كون $D \geqslant a$ من أجل جميع قيم D ، وبذلك تتحقق المتراجحة (21) ويكون احتمال اثارة الذرة نادراً . إن الاحتمال الأعظمي للاثارة يقابل سرعة تساوي $v = a\,\omega_{nm}$.

نستطيع استخدام التقريب شبه الكلاسيكي من أجل الحالات عالية الإثارة في الذرة . وفي هذه الحالات تقابل ω_{nm} التواتر الزاوي لدوران الالكترون حول النواة ، ويكون احتمال اثارة الذرة أعظمياً عندما يكون للجسيم سرعة الالكترون في الذرة . ومع ذلك ، فعندما تتحقق المتراجحة (19) لايحدث أي انتقال كمومي في الذرة ، ويُحدث الجسيم المار اضطراباً في النوة ، مرتبطاً بحركة الجسيم . يتلاشى هذا الاضطراب عندما يبتعد لجسيم . ويدعى مثل هذا التفاعل بالتفاعل الكظوم . أي أن التفاعلات الكظومة لاتسبب انتقالات كمومية ضمن حالات الطيف المنفصل .

٣ ــ الكظم والفتح المفاجيء والاغلاق المفاجيء للتفاعل :

آ ــ التغير الكظوم في التفاعل : يكون تغير طاقة التفاعل ، في هذه الحالة خلال دور واحـد من اهتزاز الجملة الذرية ، صغيراً بالمقارنة مع القيمة المطلقـة للفرق بين الحالتين المشاركتين أي :

$$| \omega_{nm}^{-1} \frac{d}{dt} < n | \hat{w}(t) | m > | << | E_n - E_m | \qquad (22)$$

ب ــ التغير الفجائي في التفاعل : تتحقق ، في هذه الحالة ، المتراجحة التالية:

$$| \omega_{nm}^{-1} \frac{d}{dt} < n | \hat{w}(t) | m > | \quad >> | E_n - E_n | \qquad (23)$$

في لحظة ما (مثل لحظة بدء تشغيل التفاعل) • ومن الملائم عند دراسة هذه الحالة الحدية أن نستخدم العلاقة :

$$\int_0^{\tau} e^{i\omega_{nm} t} \frac{d}{dt} < n | \hat{w}(t) | m > dt =$$

$$< n | \hat{w}(t) | m > \quad e^{i\omega_{nm} t} \Big|_0^{\tau}$$

$$- i\omega_{nm} \int_0^{\tau} < n | \hat{w}(t) | m > e^{i\omega_{nm} t} dt \qquad (24)$$

في العلاقة (14) • فبتعويض العلاقة (24) في العلاقة (14) منتبهين الى انعدام المقدار $< n | \hat{w}(t) | m >$ عند النهايتين ، فنجد :

$$w_{nm} = \frac{1}{\hbar^2 \omega_{nm}^2} | \int_0^{\tau} e^{i\omega_{nm} t} \frac{d}{dt} < n | \hat{w}(t) | m > dt |^2 \qquad (25)$$

فإذا تحققت المتراجحة (22) فان العامل المضروب بـ $e^{i\omega_{nm}t}$ يتغير قليلا خــلال فترة التفاعل ونستطيع اخراجه خارج اشارة التكامل ، وباجراء المكاملة نجد :

$$w_{nm} = \frac{4}{\hbar^2 \omega_{nm}^4} \left| \frac{d}{dt} < n | \hat{w}(t) | m > \right|^2 \sin^2 \left(\frac{\omega_{nm} T}{2} \right) \qquad (26)$$

أي أن $\omega_{nm} >> 1$ وبتعبير آخر نقــول ، اذا فتح التفاعل أو أغلق يبطء ، أي عندما تتحقق المتراجحة (22) ، فإن الجملة الكمومية الموجودة في الحالة غــير المنطبقــة m قبل فتح التفاعل ، تبقى في الحالة نفسها بعد اغلاق التفاعل • أما اذا فتح الاضطراب بشكل مفاجيء، أي أن $\hat{w}(t)$ قد تغير بصورة لحظية (خلال زمن Δt صغير بالمقارنةمع ω_{nm}^{-1}) وتغير بعد ذلك بصورة كظومة ثم أغلق بصورة كظومة ، فإن الإسهام الرئيسي في التكامل (25) يأتي من الاضطراب لحظة فتحه • يتغير العامل $e^{i\omega_{nm}t}$ خلال هذه الفترة الصغيرة تغيراً طفيفاً ،لذلك يمكن اخراجه خارج اشارة التكامل ثم نجري المكاملة لنحصل على الصيغةالبسيطة التالية التي تعطي احتمال الانتقال

$$w_{nm} = \frac{| < n | \hat{w}(t) | m > |^2}{\hbar^2 \omega_{nm}^2} \qquad (27)$$

حيث يمثل المقدار $\hat{w}$ في هذه العلاقة ، القيمة العظمى للتفاعل خلال عملية فتــح الاضطراب • اذا كان تغير الاضطراب سريعاً وكبيراً ، مثل اصدار أشعة بيتا مــن النوى الخفيفة ، فإن شحنة النواة تتغير بمقدار وحدة كاملة خلال زمن من رتبــة a/c وهو أصغر بكثير من دور الالكترون في حركته حــول النواة • ان تغير الشحنة الكهربائية للنواة يتبعه اعادة ترتيب الالكترونــات في الطبقات المختلفــة ينتج عنه اصدار للفوتونات • نستطيع بسهولة حساب احتمالات الانتقال الناتجة

عن مثل هذا التغير السريع في مؤثر هاميلتون وذلك بافتراض عدم تغير التابع الموجي للحالة الابتدائية خلال هذه الفترة القصيرة التي يتغير فيها الكمون •

لنأخذ مثلاً جملة كمومية موجودة في الحالة الموصوفة بالتابع الموجي φ_m (حيث φ_m هو التابع الذاتي لمؤثر هاميلتون $\hat{H}_0$) في اللحظة $t = 0$ • سنفترض أنه في اللحظة $t = 0$ تغير مؤثر هاميلتون فجأة ثم لم يتغير بعد ذلك وبقي مساوياً $\hat{H}$ • لنرمز للتابع الموجي الذاتي للمؤثر $\hat{H}$ بـ Ψ_n ولقيمه الذاتية بـ E_n • كما أن الجملة بقيت ممثلة بالتابع الموجي φ_m بعد انتهاء التغير الفجائي لـ $\hat{H}_0$ ، لذلك نكتب

$$\Psi(r, 0) = \varphi_m(r) = \sum A_{nm}\psi_n(r). \qquad (28)$$

حيث

$$A_{nm} = \int \varphi_m(\mathbf{r})\, \Psi^*_n(\mathbf{r})\, d_3\mathbf{r} \qquad (29)$$

تعين القيمة المطلقة للأمثال (29) ، احتمال تغير الجملة من الحالة الابتدائية φ_m الى الحالة النهائية Ψ_n ، ويعطى تغير التابع (28) مع الزمن بحل المعادلة :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \hat{H} \Psi$$

لذلك نكتب :

$$\Psi(r, t) = \sum_n A_{nm}\psi_n(r)\, e^{-iE_n t/\hbar}, \quad t \geqq 0. \qquad (30)$$

وسنحسب ، كمثال ، احتمال اثارة الكترون ذرة عندما تتغير شحنة نواتها بشكل مفاجيء من القيمة z الى القيمة $z \mp 1$ وهي حالة اصدار الكترون أو بوزيترون

من النواة • وللتسهيل سنأخذ ذرة تملك الكتروناً واحداً يتحرك في حقل نواة شحنتها ze • ان الحالة الابتدائية لهذه الذرة توصف بالتابع الموجي

$$\varphi_{10} = 2\left(\frac{z}{a}\right)^{3/2} e^{-zr/a}\, Y_{00} \qquad (31)$$

حيث $a = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$ • وبعد التغير المفاجئ في شحنة النواة يكون للحالات المستقرة المستقرة توابع موجية مماثلة للتوابع الموجية في شبيهات الهيدروجين لنواة عددها الذري $z \pm 1$ •

$$\Psi_{nl}(r, \theta, \varphi) = f_{nl}(r)\, Y_{lm}(\theta, \varphi) \qquad (32)$$

فإذا استخدمنا العلاقة (29) نجد أن احتمال الاثارة الى السوية nl خلال اصدار النواة يعطى بمربع العلاقة :

$$A_{nl,10} = \int \Psi^*_{nl}\, \varphi_{10}\, d_3 r$$

وباستخدام العلاقتين (31) , (32) نجد أن الانتقال الوحيدالذي يقابل قيماً غير معدومة للأمثال $A_{nl,10}$ هو الانتقال الى الحالات s • فباستخدام الصيغة الصريحة لتابع الموضع $f_{nl}(r)$ من أجل نواة عددها الذري $z \mp 1$ نحسب الأمثال $A_{n0,10}$ • فمن أجل الحالة $2s$ مثلاً ، لدينا :

$$f_{20}(r) = \left(\frac{z \pm 1}{2a}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{(z \pm 1)r}{a}\right) e^{-(z \mp 1)r/2a}$$

وبناءً عليه نجد

$$A_{20,10} = 2\left(\frac{z}{a}\right)^{3/2} \int f_{20}(r)\, e^{-\frac{zr}{a}} r^2\, dr = \mp 2 \frac{[2^3 z(z \pm 1)]^{3/2}}{(3z \pm 1)^4} \qquad (33)$$

ويكون احتمال الانتقال $(1s \rightarrow 2s)$ عندما تتغير شحنة النواة من ze الى $(z \mp 1)e$ هو :

$$w(1s \rightarrow 2s) = \frac{2^{11} z^{3} (z \pm 1)^{3}}{(3z \pm 1)^{8}} \qquad (34)$$

عندما يكون العدد الذري z كبيراً يكون تغير الطاقة الكامنة $w = \pm \frac{e^2}{r}$ صغيراً ونستطيع عندها استخدام العلاقة (27) من أجل ايجاد احتمالات الناتجة عن تغير مفاجيء في مؤثر هاميلتون . وبما أن للنواة عدداً ذرياً قدره z فيكون $E_{2s} - E_{1s} = \frac{3z^2 e^2}{8a}$ ويكون عنصر المصفوفة لمؤثر الاضطراب $\hat{w}$ لتوابع شبيهات الهيدروجين

$$\langle 1s | \hat{w} | 2s \rangle = 4\sqrt{2}\ z e^2 / 27 a$$

وباستخدام العلاقة (27) نجد :

$$w(1s \rightarrow 2s) = 2^{11}\ 9^{-4}\ z^{-2} \simeq 0.312\ z^{-2}$$

وهي النتيجة نفسها التي نحصل عليها من العلاقة (34) من أجل قيم كبيرة لـ z .

تمرين : أوجد الاحتمال الكلي لتأيين أو اثارة ذرة التريتيوم عندما تصدر نواتها أشعة بيتا .

تمرين : أوجد احتمال الإثارة الى السوية n في ذرة التريتيوم عندما تصدر نواتها أشعة بيتا .

٤ ـ احتمال الانتقال خلال واحدة الزمن :

اذا كان لمؤثر الاضطراب قيمة ثابتة بين لحظة فتحه ولحظة اغلاقه ، وكــان معدوماً فيما عدا ذلك ، فإن العلاقة التي تعطي احتمــال الانتقال (14) تصبح سهلة عمليا ، ويمكننا التحدث عن انتقالات تحت تأثير اضطراب ثابت • وبما أن عنصر المصفوفة $< n | \hat{w} | m >$ مستقل عن الزمن ، فإننا نستطيع حساب التكامل في العلاقة (14) فنجد :

$$\int_0^{\tau} < n | \hat{w} | m > \; e^{i\omega_{nm} t} \, dt = < n | \hat{w} \, m > \frac{e^{i\omega_{nm}\tau} - 1}{i\omega_{nm}}$$

ويكون احتمال الانتقال خلال فترة تطبيق الاضطراب مساوياً

$$w_{nm}(\tau) = \frac{2}{\hbar^2} | < n | \hat{w} | m > |^2 \; F(E_n - E_m) \quad (35)$$

حيث

$$F(x) = \frac{1 - \cos\left(\frac{x\tau}{\hbar}\right)}{(x/\hbar)^2}$$

يأخذ التابع $F(E_n - E_m)$ قيمته العظمى $\frac{1}{2}\tau^2$ عندما تكون $E_m = E_n$ ، كما ينعــدم من أجل $E_n - E_m = \frac{2\pi\hbar}{\tau}$ ومضاعفاتها • ويكون احتمال الانتقال متناسباً مع τ^2 من أجل قيم صغيرة لـ τ أي $\tau << \hbar/E_n$ • أما اذا كان τ كبيراً بالمقارنة مع الدور $\frac{\hbar}{E_n - E_m}$ المميز للجملة ، عنــدها يمكن أن نعبر عــن التابع F بدلالة التابع دلتا فنكتب :

$$F(E_n - E_m) = \pi \tau \hbar \, \delta(E_n - E_m)$$

ويكون احتمال الانتقال في هذه الحالة مساوياً

$$w_{nm} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n | \hat{w} | m \rangle|^2 \, \tau \, \delta(E_n - E_m) \quad (36)$$

ولقد وجد أن احتمال الانتقال متناسب مع τ لذلك يمكننا تعريف احتمال الانتقال خلال واحدة الزمن بالعلاقة :

$$P_{nm} = \frac{w_{nm}}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n | \hat{w} \, m \rangle|^2 \, \delta(E_n - E_m)$$
(37)

ويصح هذا التعريف عند تحقق المتراجحة المضاعفة

$$\hbar E_m^{-1} \leqslant \tau \leqslant T$$

تقع الحالة النهائية ، وأحياناً الحالة الإبتدائية ، للجمل الفيزيائية ضمن زمرة الحالات المستمرة أو المستمرة تقريبا . وتقارن القياسات التجريبية مع الاحتمال الكلي للانتقال الى كل الحالات n التي لها الطاقة نفسها وعناصر المصفوفة $\langle n | \hat{w} | m \rangle$ نفسها . وللحصول على هذا الاحتمال يجب اجراء جمع العلاقة (37) على كل الحالات n .

اذا رمزنا لعدد الحالات النهائية ، من أجل نوع معين ضمن مجال طاقة وحيد E_n ، بـ $\rho(E_n)$ عندها يعطى الاحتمال الكلي للانتقال خلال واحدة الزمن بالعلاقة

$$P_{nm} = \int \tilde{p}_{nm} \, \rho(E_n) \, dE_n = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n | \hat{w} | m \rangle|^2 \, \rho(E_n)$$
(38)

مع الشرط $E_m = E_n$ الذي يعبر عن انحفاظ الطاقــة خلال الانتقال الكوانتي، تدعى العلاقة (38) بقاعدة فيرمي الذهبية •

٥ ـ التفاعل بين الجمل الكمومية والاشعة الكهرطيسية :

نعبر عن التفاعل بين جسيم كتلته μ معدوم السبن شحنته e ، مع الحقل الكهرطيسي الممثل بالكمون المتجه A بالعلاقة الرياضية :

$$\hat{W}(t) = -\frac{e}{\mu c}(\hat{A} \cdot \hat{P}) + \frac{e^2}{2\mu c^2}\hat{A}^2 \qquad (39)$$

حيث $\hat{A}$ هو مؤثر الكمون المتجه و $\hat{P}$ هو مؤثــر الاندفــاع للجسيم • فاذا استخدمنا نظرية الاضطراب لحساب احتمال الانتقــال ستكون على شكل سلسلة قــوى لمؤثر التفــاعل $\hat{W}(t)$ • فمن أجل التقريب الأول نستطيع الإبقاء على الحد الأول فقط من المعادلة (39) أي :

$$\hat{W}(t) = -\frac{e}{\mu c}(\hat{A} \cdot \hat{P}) \qquad (40)$$

عند اهمال المؤثر (40) يتألف مؤثر هاميلتون للجملة كلهــا من مجمــوع مؤثر هاميلتون للذرة H_a ومؤثر هاميلتون للحقــل الكهرطيسي H_{ph} • ولســوف نفترض أننا نعرف حل معادلة شرودينغر للذرة

$$(H_a - E_m)\varphi_m = 0$$

واخترنا هاميلتوني الحقل الكهرطيسي ممثلاً وفق التكميم الثاني

$$\hat{H}_{ph} = \sum_{Q,\alpha} (\hat{a}^{\dagger}_{Q\alpha}\hat{a}_{Q\alpha} + \tfrac{1}{2}).$$

وفي هذه الحالة يقابل التابع الذاتي $|n_{Q\alpha}>$ الفوتون $n_{Q\alpha}$ في ذلك الحقـل ، وتتميز حالات الجملة الكاملة ــ الذرة والحقل دون تفاعل ــ بالتوابع

$$|n_{Q\alpha}> \varphi_m \qquad (41)$$

فإذا عوضنا في المعادلة (40) مؤثر الحقل

$$\hat{A}(r,t) = \sum_{Q,\alpha}\left(\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega_Q}\right)^{1/2} e^{i(Q\cdot r)}\, e_\alpha(Q)[\hat{a}_{Q\alpha}(t) + \hat{a}^\dagger_{-Q,\alpha}(t)],$$

$$\hat{P}(r,t) = i\sum_{Q,\alpha}\left(\frac{\hbar\omega_Q}{8\pi c^2 V}\right)^{1/2} e^{-i(Q\cdot r)}\, e_\alpha(Q)[\hat{a}^\dagger_{Q\alpha}(t) - \hat{a}_{-Q,\alpha}(t)].$$

عندها يكون لمؤثر الاضطراب الصيغة :

$$\hat{W}(t) = -\frac{e}{\mu}\sum_{Q,\alpha}\left(\frac{2\pi\hbar}{V\omega_Q}\right)^{1/2} e^{i(Q\cdot r)}\,(e_\alpha(Q)\cdot\hat{p})\,[\hat{a}_{Q\alpha}(t) + \hat{a}^\dagger_{-Q,\alpha}(t)], \qquad (42)$$

حيث $\hat{a}_{Q,\alpha}(t) = \hat{a}_{Q,\alpha}e^{-i\omega_Q t}$ هو تمثيل هايزنبرغ لمؤثر الإفناء للفوتون $Q\alpha$ و $\hat{a}^+_{Q\alpha}(t)$ هو مؤثر الخلق للفوتون نفسه • أي تميز كل حد من مؤثر التفاعل بعملية امتصاص (إفناء) أو اصدار (خلق) فوتون للجملة الذرية •

ننظر الى جزء المؤثر (42) المقابل لإصدار الفوتون $Q\alpha$ ،والذي نكتبه بالشكل

$$\hat{W}^+ e^{-i\omega_Q t}$$

حيث

$$\hat{W}^+ = -\frac{e}{\mu}\left(\frac{2\pi\hbar}{V\omega}\right)^{1/2} e^{i(Q\cdot r)}\,(e_\alpha(Q)\cdot\hat{P})\,\hat{a}^+_{Q,\alpha}\,; \qquad \omega = Qc \qquad (43)$$

إذا تميزت الحالة الابتدائية للجملة الكاملة (دون تفاعل متبادل) بالتابع $|init> = |n_{Q\alpha}> \varphi_m$ فإن المؤثر (43) ينقل الجملة الى الحالة $|fin> = |n_{Q\alpha} + 1> \varphi_n$.

فإذا تذكرنا أن مؤثرات الخلق للفوتون تحقق العلاقة :

$$\hat{a}^{+}_{Q\alpha} \; |n_{Q\alpha}> = (n_{Q\alpha} + 1)^{1/2} \; |n_{Q\alpha} + 1>$$

نجـد :

$$< fin | \hat{W}^{+} | init > =$$

$$= -\frac{e}{\mu}\left(\frac{2\pi\hbar}{V\omega}\right)^{1/2} (n_{Q\alpha} + 1)^{1/2} (e_{\alpha}(Q) \cdot < \varphi_n | e^{-Q.r} p | \varphi_m > \quad (44)$$

ويكون احتمال اصدار الجملة الذرية لفوتون خلال واحدة الزمن ، استناداً الـى العلاقة (38) :

$$P^{(+)}_{nm} = \frac{2\pi}{\hbar} |< fin | \hat{w}^{+} | init >|^{2} \rho(E^{+}_{fin}) \qquad (45)$$

حيث $\rho(E^{+}_{fin})$ هي كثافة الحالات النهائية .

نستطيع نشر الأس في عنصر المصفوفة على شكل سلسلة قوى :

$$e^{-i(Q \cdot r)} = 1 - i(Q \cdot r) - \frac{(Q \cdot r)^{2}}{2!} + \ldots \qquad (46)$$

فإذا أخذنا الحد الأول فقط أي :

$$< n | e^{-i(Q \cdot r)} \cdot \hat{p} | m > \simeq < n | \hat{p} | m > \qquad (47)$$

نحصل على مايدعى بتقريب الموجات الطويلة ، فإذا انعدم هذا الحد نأخذ الحد الثاني في النشر (46) .

نستطيع أيضاً استبدال بمؤثر الاندفاع الوارد في العلاقة (47) مؤثر الموضع من خلال العلاقة :

$$< n | \hat{p} | m > = \frac{i\mu}{\hbar}(E_n - E_m) < n | \hat{r} | m > \quad (48)$$

نحصل بالتعويض في العلاقة (44) على عنصر مصفوفة الانتقال لذي القطبين الكهربائي وفق تقريب الموجات الطويلة أي :

$$< fin | \hat{w}^+ | init > =$$

$$- i\omega_{nm} \left(\frac{2\pi\hbar (n_{Q\alpha} + 1)}{V\omega} \right)^{1/2} (e_\alpha (Q \cdot d_{nm}) \quad (49)$$

حيث يدعى المقدار $d_{nm} = e < n | \hat{r} | m >$ بعزم ذي القطبين الكهربائي في حالة الانتقال $(m \rightarrow n)$ • وتدعى الأشعة الكهرطيسية المنتجة لعنصر المصفوفة d_{nm} غير المعدوم باشعاع ذي القطبين ويرمز لها بالرمز E1 .

لا بد لحساب العلاقة (45) التي تحدد احتمال اصدار الكم $\hbar\omega$ خلال واحدة الزمن من حساب كثافة الحالات $\rho(E^+_{fin})$ • يحدد عدد الحالات للحقل في الحجم V من أجل استقطاب فوتوني معين واندفاع قيمته بين p و p + dp ، وضمن عنصر الزاوية المجسمة dΩ بالعلاقة :

$$dN_p = \frac{VP^2 \, dp \, d\Omega}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{V\epsilon^2 \, dp \, d\Omega}{c^2 \, (2\pi\hbar)^3}$$

وبما أن $\frac{dp}{d\epsilon} = \frac{1}{c}$ لذلك تكون كثافة الحالات المقابلة :

$$d\rho (E) = \frac{dN_p}{d\epsilon} \frac{V \omega^2 d\Omega}{(2\pi c)^3 \hbar} \qquad (50)$$

بتعويض العلاقة (49) والعلاقة (50) في العلاقة (45) نحصل على احتمال اصدار فوتون استقطابه e_α (Q) وتواتره $\omega_{nm} = \omega$ ضمن عنصر الزاوية المجسمة $d\Omega$ وخلال واحدة الزمن أي :

$$dp^+_{nm} = \frac{\omega^3 (n_{Q\alpha} + 1)}{2\pi c^3 \hbar} | e_\alpha \cdot d_{nm} |^2 d\Omega \qquad (51)$$

إن شعاع الاستقطاب e_α يعامد شعاع انتشار الضوء Q فإذا رمزنا للزاوية بين Q واتجاه عزم ثنائي اقطاب الانتقال d_{nm} بـ θ ، فنجد :

$$| e_\alpha \cdot d_{nm} |^2 = | d_{nm} |^2 \sin^2 \theta$$

ونستطيع إعادة كتابة المعادلة (51) لتأخذ الشكل :

$$dp^+_{nm} = (n_{Q\alpha} + 1) \frac{\omega^3 | d_{nm} |^2}{2\pi c^3 \hbar} \sin^2 \theta \; d\Omega \qquad (51)'$$

اذا ضربنا العلاقة (51)' بطاقة الفوتون $\hbar\omega$ نحصل على كثافة الاشعاع الصادر خلال واحدة الزمن ضمن عنصر الزاوية المجسمة $d\Omega$:

$$dJ_{nm} = \frac{(n_{Q\alpha} + 1) \omega^4}{2\pi c^3} | d_{nm} |^2 \sin^2 \theta \; d\Omega \qquad (51)''$$

يتضح من هذه العلاقـات أن احتمال اصدار الفوتون غير معدوم حتى ولو لم يتوافر أي فوتون في الحالة الابتدائية ($n_{Q\alpha} = 0$) ويدعى مثل هذا الاصدار بالاصدار التلقائي ، أما الاصدار الذي تتناسب كثافته مع عدد الفوتونات في الحالة الابتدائية $n_{Q\alpha}$ فيدعى بالاصدار المحثوث وهو أساس عمل الاجهزة الليزرية .

إن كثافة الاصدار التلقائي "(51) ماهي الا متوسط الطاقة الصـادرة عـن ثنائي أقطاب كهربائي خلال واحـدة الزمن وضمن عنصر الزاوية المجسمة $d\Omega$.

$$d(t) = 2\sqrt{|d_{nm}|^2}\cos\omega t$$

بمكاملة العلاقة '(51) مع جعل $n_{Q\alpha} = 0$ ،على كل اتجاهات الاشعاع نحصـل على الاحتمال الكلي للانتقـال خلال واحدة الزمن من أجل اصدار فوتون واحد :

$$p_{nm} = \frac{2\omega^3}{3\hbar c^3}|d_{nm}|^2 = \frac{2}{3}\frac{e^2}{\hbar c}\frac{|r_{nm}|^2}{c^2}\omega^3 \qquad (52)$$

ولكي نأخذ فكرة عن قيمة هذا الاحتمال نضع $r_{nm} = a$ فنجد :

$$p_{nm} \simeq \frac{e^2\omega}{\hbar c}\left(\frac{\omega a}{c}\right)^2 \simeq \frac{\omega}{137}\left(\frac{\omega a}{c}\right)^2 \qquad (53)$$

ففي حالة التفاعل الكولوني يكون $a \simeq \frac{e^2}{\hbar\omega}$ ومنه

$$P_{nm} \simeq \frac{\omega}{(137)^3} \qquad (53)'$$

فمن أجل الاشعة الضوئية تكون $\omega \sim 10^{15}\ sec^{-1}$ ويكون احتمال الانتقال $10^{-9}\ sec^{-1} \sim$ ومن أجل أشعة غاما $\omega \sim 10^{21}\ sec^{-1}$ يكون $p_{nm} \sim 10^{15}\ sec^{-1}$.

إذا أعدنا الدراسة السابقة من أجل المؤثر $\hat{a}_{\omega}^{-}\ e^{-i\omega t}$ نستطيع تعيين احتمال امتصاص الفوتون خلال انتقال الجملة الذرية من الحالة m الى الحالة n ، ونجد أن احتمال امتصاص ضوء استقطابه e_{α} خلال واحدة الزمن ضمن عنصر الزاوية المجسمة $d\Omega$ هو

$$dp_{nm}^{-} = \frac{n_{Q\alpha}\ \omega^{3}}{2\pi c^{3}\ \hbar} \mid e_{\alpha} \cdot d_{nm}) \mid^{2} d\Omega \qquad (54)$$

إذا كان الاشعاع الكهرطيسي في الحالة الابتدائية متوازناً مع اشعاع الجسم الأسود في الدرجة T ، نستبدل بعدد الفوتونات $n_{Q\alpha}$ في العلاقتين (51) و (54) متوسط عدد الفوتونات في تلك الدرجة أي

$$\bar{N} = [\ e^{\hbar\omega/KT} - 1\ ]^{-1}$$

وفي هذه الحالة يكون اتجاه واستقطاب الأشعة اختياريين ، لذلك يجب اجراء الجمع في العلاقتين (51) و (52) فنحسب احتمال الامتصاص والإصدار المحثوث الكلي خلال واحدة الزمن لفوتون تواتره ω فنجد :

$$P_{nm}^{+} = \bar{N}\ \frac{2\omega}{3\hbar c^{3}} \mid d_{nm} \mid^{2}$$

$$P_{nm}^{-} = \bar{N}\ \frac{2\omega}{3\hbar c^{3}} \mid d_{nm} \mid^{2}$$

تمرين : وضعت ذرة هيدروجين ، مثارة الى الحالة 2p الاولى ، في فجوة. ماهي درجة حرارة هذه الفجوة التي يتساوى فيها احتمال الاصدار التلقائي مع احتمال الاصدار المحثوث؟

تمرين : ماهو احتمال الاصدار التلقائي خلال واحدة الزمن لذرة هيدروجين في الحالة المثارة الأولى؟



ـ مسائل ـ

١ ـ يهتز جسم مشحون بحركة توافقية خطيـــة تحت تأثير حقـــل كهربائي معطى بالعلاقة

$$E(t) = \frac{A}{\sqrt{\pi \tau}}\, e^{-(t/\tau)}$$

حيث A و τ ثوابت ، فإذا كان الهزاز في حالتـــه الأساسية في اللحظـــة $t = -\infty$ ، أوجد احتمال وجود الهزاز في الحالة المثارة الأولى في اللحظة $t = \infty$.

٢ ـ وضعت ذرة هيدروجين ضمن حقل كهربائي معطى بالعلاقة

$$E(t) = \frac{\beta \tau}{2\pi}\, \frac{1}{\tau^2 + t^2}$$

حيث β و τ ثابتان ، فإذا كانت ذرة الهيدروجين في حالتها الاساسية في اللحظة $t = -\infty$ احسب احتمال وجودها في الحالة المثارة $2P$ في اللحظـــة $t = \infty$.



الفصل السادس

نظرية التبعثر الكلاسيكية

نظرية التبعثر Theory of Scattering

١ ـ مقدمة :

عندما توجه حزمة من الجسيمات ، مهما كان نوعها ، نحو مادة ما ، تنحرف جسيمات الحزمة مبتعدة عن مسارها الأصلي نتيجة للتصادم مع جسيمات المادة التي تتجه نحوها • وتتجلى أهمية دراسة عملية التبعثر في تحديد ظواهر كثيرة ،ولو بصورة جزئية مثل ايقاف الالكترونات ضمن الغازات المؤينة ، وتصادم جزيئات الغاز ، وايقاف الجسيمات والاشعة الكونية • كذلك تهيء لنا الدراسة التفصيلية لعملية التبعثر ونتائجها معرفة طبيعة الجسيمات المتبعثرة ، ولقد أتى الجزء الأكبر مما نعرفه اليوم في الفيزياء الذرية والنووية من دراسات ترتبط بالتبعثر والقياسات الممثلة لعملية التبعثر •

٢ ـ النظرية الكلاسيكية للتبعثر :

استندت الفكرة المبكرة حول الذرة على أنها شيء تام المرونة له شكل كروي تقريباً وبسبب الحركة العشوائية لذرات الغاز تتصادم الذرات مع بعضها وتعاني من انحرافات في اتجاه حركاتها • يرتبط احتمال تصادم الذرات بثلاثة عوامل هي كثافة الجسيمات وحجمها ومتوسط سرعتها • فإذا كان للجسيمات شكل كروي نصف قطره a ، فسيحدث الاصطدام كلما اقترب مركزا جسيمين الى مسافة $d = 2a$ • ولحساب احتمال اصطدام جسيم مع آخر خلال فترة قصيرة dt ، نأخذ اسطوانة سطح قاعدتها πd^2 وارتفاعها $dx = v\,dt$ وهي المسافة التي يقطعها الجسيم خلال الفترة dt • إن احتمال التصادم يساوي احتمال تواجد مركز جسيم آخر ضمن هذه الاسطوانة أي

$$dP = \rho \pi d^2 v\, dt \qquad (1)$$

حيث ρ هي كثافة الجسيمات • ويكون هذا الاحتمال صحيحاً من أجل زمن dt صغير لدرجة كافية لجعل dP صغيراً ، اذ أن الانتظار يؤدي الى وجود جسيمات كثيرة ضمن هذه الاسطوانة فتحجب بعضها بعضاً وعندها يجب مناقشة امكانية حدوث أكثر من اصطدام واحد ، وهو أمر ندرسه في اطار نظرية التبعثر المتعدد • سنركز الاهتمام على حالات تكون فيها المادة المبعثرة رقيقة جداً بحيث نستطيع اهمال احتمال حدوث التبعثر المتعدد أي سندرس حالة أهداف رقيقة •

٢ ـ تعريف المقطع الفعال :

يمكن التعبير عن احتمال تبعثر الجسيم نتيجة اجتيازه للمسافة dx من مادة ما بدلالة مايدعى بالمقطع الفعال للتبعثر • ان كل جسيم من جسيمات الهدف سيظهر للجسيم القادم على شكل هدف مساحته πd^2 وهو المقطع الفعال للمجال الذي يمكن خلاله أن يحدث الاصطدام كما يُرى وفق اتجاه حركة الحزمة الواردة ومن هنا أتت عبارة المقطع الفعال للتبعثر • فإذا كنا نتعامل ، كما هو الحال عادة، مع نموذج يحوي العديد من الجسيمات ، عندها تكون مساحة الهدف الكلي مساوية مجموع المقاطع الفعلية للجسيمات المنفردة وهو أمر يصح في حالة نموذج رقيق فقط ، حيث يكون احتمال وجود أحد الجسيمات في طريق جسيم آخر ، نادراً • وعند عدم توافر ذلك تكون مساحة الهدف الكلي أصغر من مجموع المقاطع الفعالة للجسيمات • اذا كان الهدف رقيقا لدرجة كافية أي اذا كان لدينا قطعة من مادة سطحها A وسماكتها dx (تحوي $\rho A\, dx$ جسيماً فإنها ستظهر كهدف فعال سطحه $\rho A \sigma\, dx$ • وتكون نسبة الجزء المغطى بالجسيمات الى سطح هذه القطعة مساوية $\frac{\rho A \sigma\, dx}{A} = \rho \sigma\, dx$ ويكون احتمال اصطدام الجسيم القادم مساوياً نسبة الجزء المغطى الى السطح الكلي أي

$$dP = \rho \sigma dx \qquad (1')$$

وبتعويض $\sigma = \pi d^2$ في العلاقة $(1')$ تتـوصل الى العلاقة (1) نفسها • تعطي العلاقة $(1')$ الارتباط الأساسي بين احتمال التصادم والمقطع الفعال للتبعثر•

٤ ــ توزع المسارات الحرة :

نعرّف المسار الحر بأنه المسافـة التي يقطعها الجسيم بين اصطدامين متتاليين، وتتغير هذه المسافة بصورة عشوائية مرتبطـة بمكان وجـود الجسيمات المبعثرة ، وقد يأخذ المسار الحر قيمة كبيرة بسبب التوز عالعشوائي للمبعثرات ولكننـا سنبحث عن قيمة احصائية للمسار الحر تقترب منها معظـم قيم المسارات الحـرة وتدعى بالمسار الحر الوسطي • نبدأ بحساب احتمـال عـدم حـدوث اصطدام $Q(x)$ خلال المسافة x وهذا يمثل احتمال كون المسار مساوياً x أو أكبر من x • يتناقص هذا الاحتمال $Q(x)$ خلال المسافة dx بمقداريساوي احتمال حدوث الاصطدام خلال dx ، وهذا يساوي احتمال وصول الجسيم الى النقطة x دون اصطدام مضروباً باحتمال حدوث اصطدام عند وجـود الجسيم ضمن dx .

ان احتمال حدوث اصطدام عند وجود الجسم ضمن dx هو $\rho \sigma dx$ وذلك استناداً الى العلاقـة $(1')$ وبالتالي يكون $dQ = - Q \rho \sigma dx$ وبالتكامل نجـد $Q = e^{-\rho \sigma x}$ مع الملاحظة أن $Q = 1$ من أجل $x = 0$

ان احتمال كون المسار الحر مساوياً قيمـة مابين x و $x + dx$ يساوي مشتق العلاقة السابقة أي :

$$R(x) = \left| \frac{dQ}{dx} \right| = \rho \sigma e^{-\rho \sigma x}$$

ويكون المسار الحر الوسطي مساوياً :

$$l = \int_0^{\infty} x R(x) dx = \int_0^{\infty} \rho \sigma e^{-\rho \sigma x} x dx = \frac{1}{\rho \sigma} \qquad (2)$$

٥ ـ المقطع الفعال كتابع لزاوية التبعثر :

سنناقش الآن توزع زوايا التبعثر الناتج عن الاصطدام مبتدئين بحالة خاصة يكون فيها الجسيم المتبعثر أخف بكثير من الجسيم المبعثر بحيث يمكن عد الجسم المبعثر ساكناً خلال عملية الاصطدام ، ثم نعود الى الحالة العامة في الفقرة(١٢) •

سنفترض أيضاً أن للجسيمات شكلاً كروياً مرناً نصف قطره a ونعرّف الإنحراف الزاوي θ للجسيم بأنه الزاوية بين اتجاهي الحركة قبل الاصطدام وبعده ، سترتبط زاوية الاصطدام بكيفية الاصطدام المباشر بين الجزيئات ، فهناك مثلاً حالة الاصطدام المباشر (الرأسي) ويؤدي الى زاوية انحراف قريبة من π ، وهناك الاصطدام الماس ويؤدي الى زاوية انحراف صغيرة نسبياً •

يرتبط الانحراف الزاوي θ وضوحاً بالمسافة b (وهي المسافة بين مركز الجسيم المبعثر وخط الاقتراب الأصلي للجسيم المتبعثر) والتي تدعى بمعامل الاصطدام • انظر الشكل(١) • فإذا كانت الكرات تامة المرونة ستكون زاوية الانحراف مساوية ضعف الزاوية Ψ بين الاتجاه الاصلي للحركة ومماس الكرتين عند نقطة الالتقاء أي $\theta = 2\Psi$ • وباستخدام الهندسة المستوية يمكننا أن نكتب

$$\cos\Psi = \frac{b}{2a} \quad \text{أو} \quad \theta = 2\cos^{-1}\left(\frac{b}{2a}\right)$$

الاتجاه الجديد للحركة

الاتجاه الأصلي للحركة

P

θ

b

Ψ

المبعثر

الشكل (1)

ستنحرف جميع الجسيمات القادمة بمعامل اصطدام b أصغر من $2 a \cos \Psi$ ، بزاوية أكبر من $\theta = 2 \Psi$.

اذا عرّفنا المقطع الفعال $S(\theta)$ بأنه المساحة الفعالة التي تؤدي الى انحراف أكبر من θ (في حالة نموذج الكرة المرنة) نجد :

$$S(\theta) = \pi b^2 = 4 \pi a^2 \cos^2 \Psi = 4 \pi a^2 \cos^2 \frac{\theta}{2} \qquad (3)$$

يدعى $S(\theta)$ بالمقطع الفعال الكلي للتبعثر بزاوية تساوي θ أو تزيد عليها. ومن الواضح أن جزءاً معيناً من الكرة المبعثرة يكون فعالاً في انتاج الانحرافات الكبيرة وبالتالي فإن $S(\theta)$ يتناقص مع ازدياد θ .

٦ ـ المقطع الفعال التفاضلي :

نعرّف المقطع الفعال التفاضلي $q(\theta)\, d\theta$ بأنه المقطع الفعال الذي يؤدي الى انحرافات تأخذ القيم بين θ و $\theta + d\theta$ ونحصل عليه باشتقاق $S(\theta)$ أي :

$$q(\theta) = \left| \frac{dS}{d\theta} \right| \qquad (4)$$

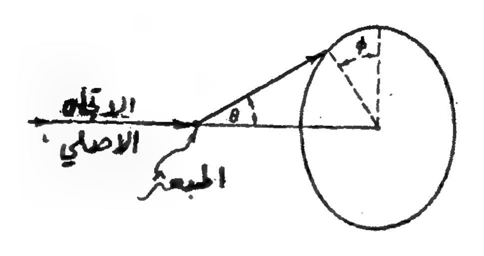
ففي حالة الكرات الصلبة المرنة نجد :

$$q(\theta) = 4 \pi a^2 \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} = 2 \pi a^2 \sin \theta \qquad (5)$$

نعرّف المقطع الفعال لواحدة الزوايا المجسمة $\sigma(\theta, \Phi)$ بأنه المساحة الفعالة المؤدية الى انحراف يقع ضمن عنصر الزاوية المجسمة $d\Omega = \sin \theta \, d\theta \, d\Phi$ ويساوي

$$\sigma(\theta, \Phi) \sin \theta \, d\theta \, d\Phi$$

ولتوضيح الزوايا الموجودة في هذه العلاقة تنظر الى الشكل (2) • الزاوية θ هي زاوية الانحراف والزاوية Φ هي زاوية خط الطول المتشكل بحركة الجسيم المنحرف نسبة الى اتجاهٍ قياسي •



الشكل (2)

ففي حالة الكرات الصلبة يكون المقطع الفعال $\sigma(\theta, \Phi)$ مستقلا عن Φ أما اذا كان للجسيم شكل غير كروي فسيرتبط احتمال الانحراف بالزاوية $d\Phi$ • إن العلاقة بين $\sigma(\theta, \Phi)$ و $q(\theta)$ هي بصورة عامة من الشكل :

$$q(\theta) = \sin\theta \int_0^{2\pi} \sigma(\theta, \Phi)\, d\Phi \qquad (6)$$

وفي حالة عدم ارتباط σ بالزاوية Φ نجد :

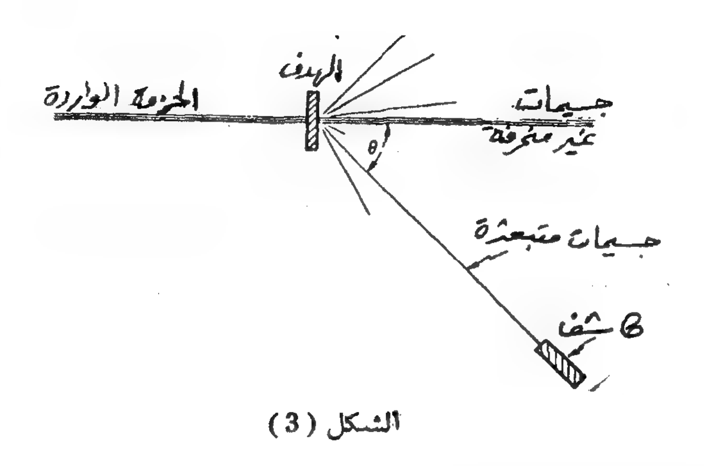
$$q(\theta) = 2\pi \sin\theta\, \sigma(\theta) \qquad (6')$$

فمن أجل الكرات الصلبة نجد :

$$\sigma = a^2 \qquad (6'')$$

وهذا يعني تساوي احتمالات التبعثر في الاتجاهات كافة • ويبين الشكل (3) ترتيبات مخبرية لمسألة التبعثر ، وتحصى الجسيمات المتبعثرة بمساعدة

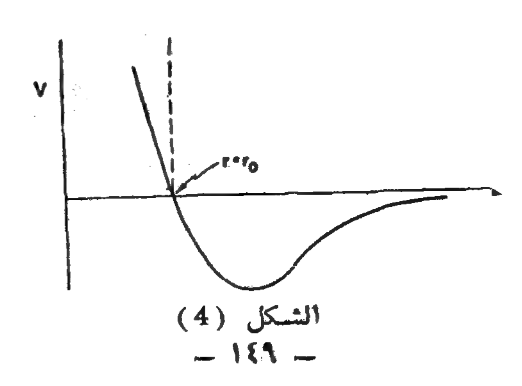
كاشف ، ويكون عدد الجسيمات المتبعثرة الملتقطة بالكاشف في واحدة الـزمن مساوياً $j\rho\sigma\,dx\,d\Omega$ حيث j هو كثافة تيار الجسيمات الواردة و $d\Omega$ هـي الزاوية المجسمة للكاشف من الهدف . فإذا قسنا عدد الجسيمات المتبعثرة نستطيع حساب σ عند معرفة كل من ρ و j .



الشكل (3)

٧ ـ النظرية العامة للتبعثر :

لقد عالجنا حتى الآن مسألة التبعثر مفترضين أن الجسيمات تسلك سـلوك الكرات الصلبة المرنة ، ولكننا نعلم عـدم صحة هذا الافتراض بصورة عامة . يمكن التعبير عن القوى بين الذرات بمنحني الكمون المبين بالشكل (4) . فالـذرات تتجاذب اذا كانت المسافـة بينها كبيرة وتدافع في حالة المسافة الصغيرة ، ويوجد



الشكل (4)

قيمة معينة r_0 للمسافة بين ذرتين ، يصعب تقريب الذرات الى مسافة أصغر منها ، ويمكن استخدامها كتعريف للقيمة التقريبية لنصف قطر الذرة الفعال •

فللكرة الصلبة كمون معدوم من أجل $r > r_0$ وتصبح قيمته لانهائية من أجل $r \leqslant r_0$ ، وتقترب بعض الجمل من كونها كرات صلبة أكثر من جمل أخرى ففي ذرات الغازات النبيلة تكون القوة الجاذبة صغيرة جداً بينما تزداد القوةالدافعة بشكل حاد وتتصرف الذرات ككرات صلبة ، بينما لاتظهر القوة الدافعة بصورة حادة فيحالة ذرات الصوديوماذ يؤمن الكمون بينالجسيمات المشحونة $V = \frac{e^2}{r}$ قوة لينة لدرجة لايمكن معها استخدام الكرات الصلبة كتقريب جيد •

يجب علينا اذن أن نعمم معالجتنا بشكل نستطيع معه حساب المقاطع الفعالة من أجل أي قانون للقوة متناظرٍ كروياً • إننا نعلم أن مسار الجسيم الخاضع الى قوة مركزية (متناظرة كروياً) يقع دوماً في مستوٍ واحد كما فيالشكل (5) • سنعرّف أولاً معامل الاصطدام b وهي المسافة بين مركز القوة المبعثرة وخط الاقتراب الأصلي ، سيسلك الجسيم مساراً ما كما في الشكل (5) ، الحالة المرسومة في الشكل من أجل قوة دافعة أما في حالة قوة جاذبة فسينحني المسار نحو الجهة الأخرى ، نرمز لزاوية الانحراف النهائي بـ θ ولأقرب مسافةيصلها الجسيم من مركز القوة بـ a • يتعين موضع الجسيم في أية لحظة بالزاويةالقطبية Φ وشعاع الموضع r •

في الحالة العامة، وبعد حل معادلات الحركة ، تتبع زاوية الانحراف θ معامل الاصطدام b أي $\theta = \theta(b)$ أو $b = b(\theta)$• ويكون المقطع الفعال للتبعثر ضمن زاوية تقع بين θ و $\theta + d\theta$ مساوياً مساحة الحلقة $(2\pi b\,db)$ التي يجب أن تكون الجسيمات ضمنها لتنحرف ضمن المجال $(\theta + d\theta \; , \; \theta)$ أي :

$$q(\theta)\, d\theta = 2\pi b \frac{db}{d\theta} d\theta \qquad (7)$$

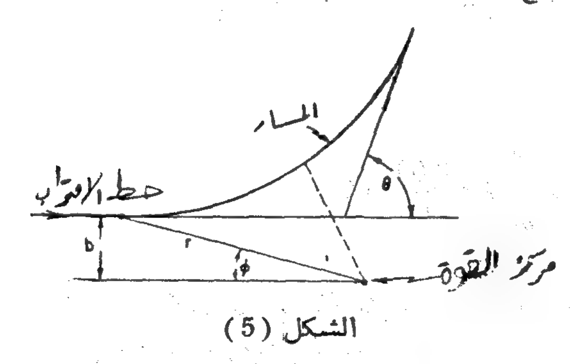
ونحصل على المقطع الفعال الكلي للتبعثر وفق الزاوية θ أو أكبر بمكاملة العلاقة (7) من $b = 0$ الى $b = b(\theta)$ فنجد :

$$S(\theta) = \int_0^{b(\theta)} 2\pi b\, db = \pi b^2(\theta) \qquad (7')$$

وهي مساحة دائرة نصف قطرها $b(\theta)$ • ونحصل على المقطع الفعال الكلي من أجل التبعثر وفق كل الزوايا الممكنة بوضع $\theta = 0$ في الصيغة (7′) فنجد :

$$S(0) = \int_0^{\pi} q(\theta)\, d\theta = \pi b^2(0) \qquad (7'')$$

ولكي نستطيع حساب مختلف المقاطع الفعالة لابد ، من حيث المبدأ على الاقل من معرفة مسار الجسيم واستخدام معادلة هذا المسار من أجل ايجاد زاوية الانحراف θ كتابع لمعامل الاصطدام b .



الشكل (5)

٨ ـ تقريب الانحرافات الصغيرة (نظرية الاضطراب الكلاسيكية):

سنطرح الآن طريقة تقريبية للحل من أجل $b(\theta)$ ، وهي طريقة جيدة عندما

تكون الزاوية θ صغيرة • وتنتج الانحرافات الصغيرة عادة من القوى الضعيفة، وتكون القوة ضعيفة عندما يكون الجسيم أبعد مايمكن عن المركز أي عندما يكون معامل الاصطدام (b) كبيراً • سنبدأ بايجاد صيغة لزاوية الانحراف θ فنختار المحور x وفق الاتجاه الأصلي للحركة ونختار المحور y معامداً له ،ولنفترض أن p هو الاندفاع الابتدائي وبالطبع هو باتجاه المحور x • سيكتسب الجسيم تحت تأثير القوة ، مركبة للاندفاع باتجاه المحور y ولتكن P_y وتعطى زاوية الانحراف بالعلاقة : $\sin\theta = \frac{P_y}{P}$

الخطوة التالية هي الحل من أجل P_y ، فبما أن P_y معدوم القيمة لحظة البدء فإننا نستطيع ، مستخدمين قانون نيوتن في الحركة ، أن نكتب :

$$P_y = \int_{-\infty}^{\infty} F_y \, dt$$

فمن أجل قوة متناظرة كروياً لدينا $F_y = \frac{y}{r} F$ حيث F هي القوة الكلية ومنه

$$P_y = \int_{-\infty}^{\infty} y \frac{F(r)}{r} dt$$

ولتنفيذ هذا التكامل لابد من معرفة كل من y و r كتابعين للزمن t وهذا يعني حل معادلات الحركة • تستند طريقتنا في التقريب الى حقيقة كون زاوية الانحراف صغيرة ، وسيتابع الجسيم في مسار خطي له الاتجاه الاصلي نفسه تقريباً ، وبسرعة ثابتة تقريباً • وبما أن الإندفاع المكتسب P_y صغير فإن

اختلاف النتيجة في حساب z مما لو حسبت بغياب القوة سيكون من الدرجة الثانية . أي أننا سنفترض أن الجسيم سيتابع المسار الذي كان سيأخذه فيما لو كانت القوة معدومة فنجد :

$$y \simeq b \quad , \quad x = vt \quad , \quad r \simeq \sqrt{b^2 + v^2 t^2}$$

ومنه

$$\theta \cong \sin\theta = \frac{P_y}{p} \simeq \int_{-\infty}^{\infty} \frac{bF(\sqrt{b^2 + v^2 t^2})\, dt}{P\sqrt{b^2 + v^2 t^2}}$$

من الملائم هنا تغيير المتحـولات فنستبدل $t = b\frac{u}{v}$ ونستخدم $P = mv$ و $E = \frac{mv^2}{2}$ فنجد :

$$\theta \cong \frac{b}{2E} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{F(b\sqrt{1 + u^2})}{\sqrt{1 + u^2}} du \qquad (8)$$

ولسوف نطبق هذه النتيجة على أمثلة مختلفة .

٢ ـ قوة كولون :

لدينا في هذه الحالة $F = \frac{z_1 z_2 e^2}{r^2}$ حيث $z_1 e$ هي شحنـة الجسيم المتبعثر و $z_2 e$ هي شحنة الجسيم المبعثر . باستخدام العلاقة (8) نجد

$$\theta \cong \frac{z_1 z_2 e^2}{2bE} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{du}{(1 + u^2)^{3/2}} = \frac{z_1 z_2 e^2}{Eb} \qquad (9)$$

تشير العلاقة (9) الى تناسب زاوية الانحراف عكساً مع معامل الاصطدام b وهي نتيجـة مهمة. أما المقطع الفعال فيساوي

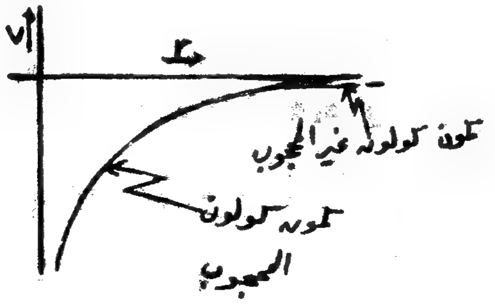
$$q(\theta) = 2\pi b \left| \frac{db}{d\theta} \right| = \frac{2\pi (z_1 z_2 e^2)^2}{E^2 \theta^3} \qquad (9')$$

ولهذه النتيجة عدة خصائص هامة :

١ ـ يتناقص المقطع الفعال ، من أجل زاوية معينة θ ، بسرعة كتابع للطاقة ويمكن تعليل هذا الامر بأن الجسيم الأسرع يحتاج الى قوة أكبر ، وتتأمن هـذه الزيادة في القوة عن طريق معامل اصطدام أصغر وبالتالي تناقص سريع لـ θ مع E .

٢ ـ يتناهى المقطع الفعال الى اللانهاية عندما تقترب θ من الصفر ، كما يتناهى المقطع الفعال المكامل $s(\theta)$ الى اللانهاية أيضـاً ويرجع ذلك الى المدى الطويل لقوة كولون، فإذا نظرنا الى انحرافات أصغر نستطيع دوماً التوصل اليها بمعاملات أكبر للتصادم وبالتالي مقاطع فعالة أكبر .

٣ ـ تحجب القوة الكولونية الناتجة عن نوى الذرات بواسطة الالكترونات الذرية عند مسافة عدة أنصاف أقطار ذرية ويغدو شكل الكمون كما في الشكل (6) .



الشكل (6)

وهي حالة الغازات المؤينة والكتروليت أيضاً ، فالايونات ذات الاشارة المتماثلة تحاط بغمامة من الشحنة تتألف من الايونات ذات الاشارة المخالفة وبالتالي تحجب الكمون الكولوني بعيداً عن هذه الايونات وبصورة عامة يتواجد مثل هذا الحجب دوماً في المسائل التطبيقية ونستخدم الكمون التالي

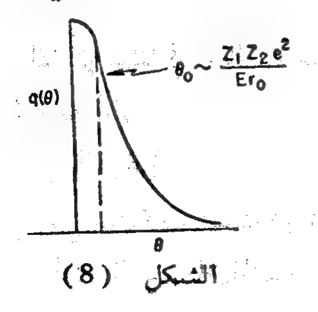
$$V = \frac{z e^2}{r} \exp\left(-\frac{r}{r_0}\right) \qquad (10)$$

كتقريب جيد للكمون الكولوني المحجوب اذ يجعل العامل الاسي القوة مهملة عندما يصبح المقدار $\frac{r}{r_0}$ أكبر بكثير من الواحد •

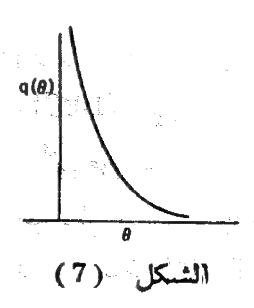
٤ ـ تقترب الزاوية θ من الصفر ، في حالة الكمون الكولوني المحجوب، بازدياد معامل الاصطدام b بسرعة أكبر من $\frac{1}{b}$ في اللحظة التي تأخذ b قيمة أكبر من نصف قطر الحجب r_0 • ويمكننا اهمال أثر التبعثر كله بعد نصف قطر الحجب بقليل وتحسب الزاوية الصغرى التي لا يزداد بعدها المقطع الفعال بجعل $b = r_0$ في المعادلة (9) فنجد

$$\theta_{min} = \frac{z_1 z_2 e^2}{E r_0} \qquad (11)$$

يبين الشكل (7) المقاطع الفعالة للكمون الكولوني غير المحجوب كتابع لزاوية الانحراف ، كما نجد في الشكل (8) المقاطع الفعالة للكمون الكولوني المحجوب•



الشكل (8)



الشكل (7)

٥ ـ يجب التذكير أن نظرية الاضطراب تفشل اذا كانت θ كبيرة ($\simeq 1/2$) ولسوف نحصل على النتيجة الدقيقة من أجل جميع قيم θ في الفقرة (١٠)٠

ب ـ قانون القوة $\frac{1}{r^3}$:

لدينا في هذه الحالة $F = \frac{k}{r^3}$ ، وبالعودة الى العلاقة (8) نجد :

$$\theta = \frac{k}{2b^2 E} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{du}{(1+u^2)^2} = \frac{\pi k}{4b^2 E} \qquad (12)$$

أو

$$b^2 = \frac{\pi k}{4E\theta} \qquad (12')$$

ويعطى المقطع الفعال التفاضلي بالعلاقة

$$q(\theta) = \pi \left| \frac{d}{d\theta} [b^2(\theta)] \right| = \frac{\pi^2 k}{4E\theta^2} \qquad (12'')$$

تمرين : أوجد المقطع الفعال التفاضلي من أجل قانون القوة $\frac{1}{r^n}$.

٩ ـ المقطع الفعال في حالة انتقال الطاقة والاندفاع :

لقد توصلنا في حالات متعددة (العلاقات (9) و (12'')) الى مقاطع فعالة لانهائية من أجل $\theta = 0$ وكذلك نتائج لانهائية عند المكاملة على مجال θ ٠وكما نوهنا في الفقرة (٨) فإن مثل هذه القيم اللانهائية تـأتي من الانحرافات الصغـيرة الناتجة من معاملات اصطدام كبيرة ، وتقابل آثاراً فيزيائية صغيرة جداً ٠ إن قوة ايقاف المادة للجسيمات المشحونة ، مثـلاً ، ترتبط بمتوسط انتقـال الطاقة من

الاتجاه الأصلي للحركـة الى اتجاه معامد • يعطى ضياع الطاقة من الاتجاه الأصلي للحركةفي عملية التصادم بالعلاقة :

$$\Delta E = \frac{(\Delta P)^2}{2m} = \frac{P^2 \sin^2 \theta}{2m} \simeq \frac{P^2 \theta^2}{2m}$$

ويعطى متوسط الطاقة المنتقلة بالعلاقة :

$$\overline{\Delta E} = \int_0^\pi q(\theta) \ \Delta E(\theta) \, d\theta \cong \frac{P^2}{2m} \int_0^\pi q(\theta) \ \theta^2 \, d\theta$$

وكقاعدة يجب عدم تجاوزها ، يكون متوسط الطاقة المنتقلة محدود القيمـة دوماً حتى في حالة تناهي المقاطع الفعالة الى اللانهاية • ففي حــالة قانــون القــوة $F = \frac{k}{r^3}$ مثلاً نجد

$$\overline{\Delta E} \cong \frac{P^2}{2m} \frac{\pi^2 k}{4E} \int_0^\pi \frac{\theta^2 \, d\theta}{\theta^2} = \frac{\pi^3 P^2 k}{8mE} \qquad (13)$$

وفي حالة قانون كولون نجد :

$$\overline{\Delta E} \cong \frac{P^2}{2m} \frac{(z_1 z_2 e^2)^2}{E^2} \int_{\theta_{min}}^{\pi} \frac{\theta^2 \, d\theta}{\theta^3} =$$

$$= \frac{\pi P^2}{m} \frac{(z_1 z_2 e^2)^2}{E^2} \ln \left(\frac{\pi}{\theta_{min}} \right) \qquad (13')$$

حيث θ_{min} هي الزاوية الصغرى لتبعثر كولون والمحددة بنصف قطر الحجب •

١٠ ـ الحل الدقيق للتبعثر :

لابد من أجل الحصول على نظرية تصلح لزوايا التبعثر الكبيرة من الحل التام لمعادلة حركة الجسيم • ومن أجل ذلك سننطلق من المعادلتين

$$mr^2 \frac{d\Phi}{dt} = mv\,b$$ (معادلة انحفاظ الاندفاع الزاوي) (14)

(معادلة انحفاظ الطاقة) (14′)

$$\frac{m}{2}\left[\left(\frac{dr}{dt}\right)^2 + r^2\left(\frac{d\Phi}{dt}\right)^2\right] + V(r) = \frac{mv^2}{2}$$

افترضنا هنا أن $V(r) \to 0$ عندما $r \to \infty$ • بتعويض المعادلة (14′) في المعادلة (14) نجد :

$$\frac{dr}{dt} = \pm \sqrt{v^2 - \frac{b^2 v^2}{r^2} - \frac{2}{m} V(r)}$$

بالنقسيم على (14) نجد :

$$\frac{d\Phi}{dr} = \pm \frac{vb}{r^2 \sqrt{v^2 - \frac{b^2 v^2}{r^2} - \frac{2}{m} V(r)}}$$

نستطيع الآن التوصل الى الزاوية θ بتكامل هذه العلاقة من $r = \infty$ حتى $r = a$ ، وهي أقرب مسافة يصلها الجسيم من مركز القوة ، ثم الى $r = \infty$ • وبالنظر الى الشكل (5) نجد أننا اذا بدأنا بـ $\Phi = 0$ نحصل بعد

التكامل على $\Delta\Phi = \pi - \theta$ أو $\theta = \pi - \Delta\Phi$ • وبما أن التكامل يجري على الحدود نفسها وقيمها نستطيع بسهولة مضاعفة تيجة التكامل على r من القيمة a الى ∞ ونكتب

$$\Delta\Phi = 2\,vb \int_a^{\infty} \frac{dr}{r^2 \sqrt{v^2 - \frac{2\,V(r)}{m} - \frac{b^2 v^2}{r^2}}} \qquad (15)$$

بالتعويض من أجل أي قيمة خاصة لـ $V(r)$ في المعادلة (15) نستطيع من حيث المبدأ حساب $\theta(b)$ ومنها $b(\theta)$ وبعدها $q(\theta)$.

مثال : تبعثر كولون (مقاطع رزرفورد)

بوضع $V(r) = \frac{z_1 z_2 e^2}{r}$ في المعادلة (15) نجد :

$$\Delta\Phi = 2\,vb \int_a^{\infty} \frac{dr}{r^2 \sqrt{v^2 - \frac{2\,z_1 z_2 e^2}{mr} - \frac{b^2 v^2}{r^2}}}$$

لإنجاز التكامل نغير المتحول $r = \frac{1}{u} \longleftarrow du = \frac{-dr}{r^2}$ فنجد :

$$\Delta\Phi = 2\,v\,b \int_0^{\frac{1}{a}} \frac{du}{\sqrt{v^2 - \frac{2\,z_1 z_2 e^2}{m} u - b^2 v^2 u^2}} =$$

$$= 2 \int_0^{1/a} \frac{du}{\left(\frac{1}{b^2} - \frac{2\,z_1 z_2 e^2}{m\,b^2 v^2} u - u^2\right)^{1/2}}$$

لقد تم تعريف a بأنه المكان حيث $\frac{dr}{dt} = 0$ وهو بالتحديد المكان الذي ينعدم فيه مخرج التكامل . وبإجراء التكامل نجد :

$$\Delta\Phi = \pi - \theta = 2\cos^{-1} \frac{z_1 z_2 e^2}{m v^2 b}$$

أو

$$\frac{z_1 z_2 e^2}{mv^2 b} = \sin\frac{\theta}{2}$$

ومنـه

$$b = \frac{z_1 z_2 e^2}{m v^2 \sin\theta/2} = \frac{z_1 z_2 e^2}{2E \sin\theta/2} \qquad (16)$$

ويعطى المقطع الفعال التفاضلي بالعلاقة :

$$q(\theta) = 2\pi b \left|\frac{db}{d\theta}\right| = \frac{\pi (z_1 z_2 e^2)^2}{4E^2} \frac{\cos\theta/2}{\sin^3\theta/2}$$

فمن أجل الزوايا الصغيرة نجد :

$$q(\theta) = 2\pi \frac{(z_1 z_2 e^2)^2}{E^2 \theta^3} \qquad (16')$$

وهي العلاقة (9) نفسها التي استخرجناها وفق الطريقة التقريبية ويكون المقطع الفعال من أجل واحدة الزوايا المجسمة مساوياً

$$\sigma(\theta) = \frac{1}{2\pi} \frac{q(\theta)}{\sin\theta} = \frac{(z_1 z_2 e^2)^2}{16 E^2 \sin^4(\theta/2)} \qquad (16'')$$

وهي علاقة رزرفورد المعروفة .

١١ ـ استخدام المقاطع الفعالة في التحري عن قانون القوة :

لقد افترضنا حتى الآن أن قانون القوة معروف وحاولنا البحث عن المقاطع الفعالة • ولكننا نستطيع مستخدمين النتائج التجريبية للمقاطع الفعالة البحث عن قانون القوة ، ويوجد طرائق متعددة للقيام بذلك وأكثرها شيوعاً هي افتراض شكل بسيط للكمون مثل $\frac{k\,e^{-r/r_0}}{r^n}$ ومحاولة البحث عن قيم الثوابت k و r_0 و n بحيث تتوافق النتائج المحسوبة مع النتائج التجريبية •

١٢ ـ التحويل من جملة مركز الكتلة الى جملةالاحداثيات المخبرية :

تم استنتاج جميع العلاقات السابقة مفترضين بقاء المبعثر ساكناً خلال الاصطدام ، ولكي ندرس الحالة العامة سننطلق من النتيجة المعروفة فيالميكانيك الكلاسيكي وهي أن معادلات الحركة للاحداثيات النسبية للجسمين المتصادمين $\xi = r_1 - r_2$ في جملة الاحداثيات المتحركة مع مركزالكتلة ، مماثلة تماماً لمعادلات الحركة لجسيم وحيد خاضع الى تأثير الكمون $V(\xi)$ نفسه ويملك الكتلة المختزلة $\mu = \frac{m_1 * m_2}{m_1 + m_2}$ والطاقة الحركية المختزلة $E = \frac{\mu}{2}\left(\frac{d\xi}{dt}\right)^2$ • وتبقى هذه النتيجة صالحة في الميكانيك الكمومي أيضاً • يمكننا اذن حل معادلة التبعثر تماماً بالأسلوب نفسه الذي اتبعناه مع الانتباه لتعريف الثوابت بصورة صحيحة •

ففي جملة احداثيات مركز الكتلة يتجه كل جسيم نحو مركز الكتلةبشكل يكونفيه مجموع الاندفاع معدوماً أي $m_1 v_1 = m_2 v_2$ ، ويتبعثر الجسيمان باتجاهين متعاكسين لكي يبقى مجموع الاندفاع معدوماً بعد الاصطدام • والمسألة

هي تحويل المقطع الفعال $q(\theta')$ المحسوب في جملة احداثيات مركز الكتلة الى جملة احداثيات المختبر التي تتم الملاحظات التجريبية فيها دوماً •

لابد أولاً من تحويل الزوايا θ' المقاسة في جملة احداثيات مركز الكتلة الى الجملة المخبرية • يتم عادة في عملية الاصطدام توجيه الجسيمات نحو الهدف الثابت في الجملة المخبرية ، سنرمز لكتلة الجسيم الثابت بالرمز m_1 ولكتلة الجسيم المتحرك بالرمز m_2 ولنفترض أن الجسيمات المتحركة تسير بسرعة ابتدائية قدرها v وفق الاتجاه الموجب للمحور x • تكون لسرعة مركز الكتلة الاتجاه نفسه وتساوي $\frac{m_2 v}{m_1 + m_2} = \vec{\omega}$ • وتكون السرعة النسبية في جملة مركز الكتلة $\left|\frac{d\xi}{dt}\right|$ مساوية v ولكل جسيم سرعة تتناسب عكساً مع كتلته • فلدينا قبل الاصطدام

بالنسبة للجسيم الأول $(u_{10})_y = 0 \quad ; \quad (u_{10})_x = -\frac{m_2 v}{m_1 + m_2}$

وكذلك

بالنسبة للجسيم الثاني $(u_{20})_y = 0 \quad ; \quad (u_{20})_x = \frac{m_1 v}{m_1 + m_2}$

أما بعد الاصطدام المسبب للتبعثر وفق زاوية قدرها θ' في جملة مركز الكتلة فيكون لدينا

$$(u_1)_x = -\left(\frac{m_2}{m_1 + m_2}\right) v \cos\theta'$$

$$(u_1)_y = -\left(\frac{m_2}{m_1 + m_2}\right) v \sin\theta'$$

$$(u_2)_x = \left(\frac{m_1}{m_1 + m_2}\right) v \cos\theta'$$

$$(u_2)_y = \left(\frac{m_1}{m_1 + m_2}\right) v \sin\theta'$$

وتبقى السرعة v دون تغير بعد الاصطدام •

للحصول على السرع في الجملة المخبرية بعد التبعثر نجمع سرعة مركز الكتلة الى المركبة وفق المحور x للسرع أعلاه فنجد :

$$(u_1)_x = \frac{(m_2 - m_2\cos\theta')}{(m_1 + m_2)} v \quad ، \quad (u_1)_y = -\left(\frac{m_2}{m_1 + m_2}\right) v \sin\theta'$$

$$(u_2)_x = \frac{(m_2 + m_1\cos\theta')}{(m_1 + m_2)} v \quad ، \quad (u_2)_y = \left(\frac{m_1}{m_1 + m_2}\right) v \sin\theta'$$

وتعطى زوايا الحركة في الجملة المخبرية بالعلاقات :

$$\tan\theta_1 = \frac{(u_1)_y}{(u_1)_x} = \frac{-\sin\theta'}{1 - \cos\theta'} = -\text{cotg}\left(\frac{\theta'}{2}\right) \qquad (17)$$

$$\tan\theta_2 = \frac{(u_2)_y}{(u_2)_x} = \frac{m_1\sin\theta'}{m_2 + m_1\cos\theta'} \qquad (18)$$

تحدد هاتان العلاقتان بشكل وحيد الزاويتين اللتين ينطلق بهما الجسيمان كتابعين لزواية التبعثر في جملة مركز الكتلة • وللحصول على المقطع الفعال في جملة المختبر نستخدم حقيقة تناسب $q(\theta')\,d\theta'$ مع عدد الجسيمات المتبعثرة ضمن زاوية محددة بـ θ' و $\theta' + d\theta'$ • بينما يمثل $q(\theta)\,d\theta$ العدد المتبعثر ضمن زاوية محددة بـ θ و $\theta + d\theta$ ، فإذا اخترنا θ بحيث ترتبط بـ θ' بعلاقة تؤمن تساوي العدد المتبعثر في كل من $d\theta$ و $d\theta'$ أي أن

$$q(\theta)\,d\theta = q(\theta')\,d\theta'$$

أو

$$q(\theta) = q(\theta')\frac{d\theta'}{d\theta}$$

فمن أجل الجسيم المتبعثر تعطى θ بالعلاقة (18) وباشتقاق هذه العلاقة نجد :

$$\sec^2\theta_2\frac{d\theta_2}{d\theta'} = m_1\frac{(m_1 + m_2\cos\theta')}{(m_2 + m_1\cos\theta')^2}$$

وبالتالي يكون

$$q(\theta) = q(\theta')\frac{\sec^2\theta(m_2 + m_1\cos\theta')^2}{m_1(m_1 + m_2\operatorname{coc}\theta')} \qquad (19)$$

وللحصول على المقطع الفعال كتابع لـ θ لابد من التخلص من θ' باستخدام العلاقة (18) .

١٣ ـ مناقشة النتائج :

فمن أجل الحالة $m_2 < m_1$ وفيها يكون الجسيم الوارد أخف من الهدف ، تصبح العلاقة (18) في حالة الزوايا الصغيرة من الشكل :

$$\theta \cong \frac{m_1}{m_1 + m_2}\theta' \qquad (20)$$

وتكون العلاقة بين θ و θ' معقدة في حالة الزوايا الكبيرة . ونحصل مثلاً على $\theta = \pi/2$ عندما تكون $\cos\theta' = -m_2/m_1$ وهذا يحدث دائماً من أجل $\theta' > \pi/2$. وتكون أكبر قيمة لزاوية التبعثر مساوية π .

أما في الحالة $m_2 > m_1$ فتكون القيمة العظمى للزاوية θ أقـل من $\pi/_2$ وتبقى العلاقة (20) صالحة من أجل الزوايا الصغيرة .

وفي حالة تساوي الكتلتين $m_1 = m_2$ نحصل على العلاقة $\theta = \theta'/_2$ **وتكون** القيمة العظمى لـ θ هي $\pi/_2$.

ونقيس أحياناً زاوية تبعثر الهدف θ_1 ونجد باستخدام العلاقة (17) أنهـا تساوي

$$\theta_1 = -\left(\frac{\pi}{2} - \theta'/_2\right)$$



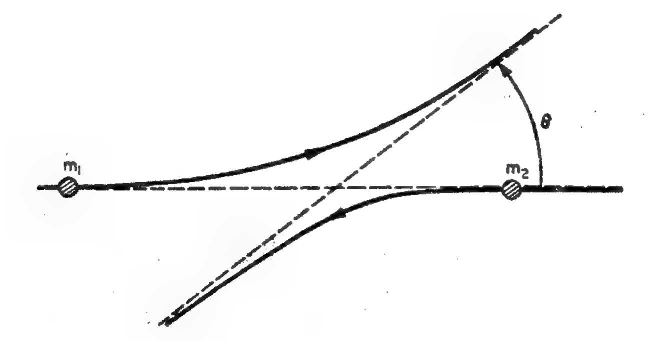
الفصل السابع

النظرية الكمومية للتبعثر

النظرية الكمومية للتبعثر

١ ـ التبعثر المرن لجسيمات معدومة السبن :

تطلق عبارة التبعثر المرن على عملية التبعثر التي لاتتغير خلالها الحالات الداخلية والبنيان للجسيمات المتصادمة • سوف ندرس هـذه المسألـة مستخدمين جملة الاحداثيات المرتبطـة بمركز الكتلة ، تكون المرحلة الأولى في عمليـة التبعثر على شكل حركة للجسمين المتصادمين نحو بعضهما ، قادمين من مسافة بعيـدة كما في الشكل (١) •



الشكل (١) التبعثر في جملة مركز الكتلة ; θ : هي زاوية التبعثر

عندما يقترب كل منهما من الآخر ، يغير التفاعل بين الجسمين حركتهما ويبتعد كل منهما عن الآخر وفق اتجاه مختلف عن الاتجاه الاصلي ، وتكون المرحلة النهائية للتبعثر على شكل حركة لجسمين يبتعدان عن بعضهما • يفضل في غالب الأحيـان رد مسألة التبعثر هذه الى مسألة مستقرة عوضاً عن الوصف اللحظي للحركة ،ويتم ذلك بافتراض وجود تيار مستمر من الجسيمات ، قادم من اللانهاية ، ويعاني تغيرات

بسبب التفاعل مع مركز التبعثر ، ويتحول الى تيار من الجسيمات المتبعثرة وتتحـدد المسألة في دراسة تيار الجسيمات المتبعثرة ، بعيداً عن مركز التبعثر ، كتابع لتيـار الجسيمات القادمة ضمن حقل قوة معين •

تتحرك الجسيمات المتبعثرة كجسيمات حرة عندما تكون بعيدة عن مركزالتبعثر وتكون طاقة حركاتها النسبية موجبة دوماً وغير مكممة • أي أننا نتعـامل مع طيف مستمر عندما ندرس مسألة التبعثر • وهكذا فإن مسألة التبعثر لجسيم كتلته μ وطاقته النسبية موجبة E في حقل الكمون $V(r)$ ، في الصيغ المستقرة تؤول الى حل لمعادلة شرودينغر •

$$(\nabla^2 + K^2)\Psi(r) = \frac{2\mu \hat{V}(r)}{\hbar^2}\Psi(r) \qquad (1)$$

حيث :

$$K^2 = 2\mu E/\hbar^2 \qquad (2)$$

سنفترض أن $V(r)$ غير معدوم ضمن مجال محدد من الفراغ $|r| \leqslant d$ وندعو هذا الجزء من الفراغ بمجال القوة او بمجال التبعثر • تتحرك الجسيمـات خارج مجال التبعثر كأجسام حرة وتتعين حالتها بالموجة المستوية

$$\varphi_a(r) = \exp i(k_a \cdot r) \quad ; \quad K_a^2 = K^2 \qquad (3)$$

محققة المعادلة (1) بعد وضع $V(r)$ مساوياً الصفر فيهـا (بدون طرف ثان) • يرتبط الشعاع الموجي k_a باندفاع الحركة النسبية p وفق العلاقة البسيطـة $p = \hbar k_a$ وينظـم التابع $\varphi_a(r)$ بجعل كثافـة التدفق للجسيمات مساويـة عددياً لسرعـةالحركة النسبية

$$J_a = \frac{\hbar}{2\mu i} (\varphi^* \vec{\nabla} \varphi_a - \varphi_a \vec{\nabla} \varphi^*_a) = \frac{\hbar k_a}{\mu} \quad (4)$$

إذا كان J_a ممثلا تدفق الجسيمات القادمةذات الحالة المعينة بالمعادلة (3)

فإن هذه الجسيمات ستتبعثر بسبب التفاعل مع حقل الكمون ، وتتحدد المسألة بالبحث عن حلول (للمعادلة (1)) يمكن كتابتها كتراكب للموجة المستوية (3) والامواج المتبعثرة الآتية من مجال التبعثر • نستطيع بسهولة الحصول على مثل هذا الحل باستخدام تابع غرين للمؤثر الموجود في الطرف الايسر من المعادلة (1) ،وهو بالتحديد مؤثر الحركة لجسيم حر •

ان تابع غرين للجسيم الحر هو $G(r|r')$ ، وهو يحقق المعادلة (1) في حالة المنبع النقطي أي

$$(\nabla^2 + k^2) G (r|r') = \delta (r - r') \quad (5)$$

فإذا عرفنا حل المعادلة (5) نستطيع دوماً كتابة الحل العام للمعادلة

$$(\nabla^2 + k^2) \Phi (r) = A (r) \quad (6)$$

بالشكل

$$\Phi (r) = \varphi (r) + \int G (r|r') A (r) d^3 r' \quad (6')$$

حيث $\varphi(r)$ هو حل للمعادلة (6) بدون طرف ثان • ان حل المعادلة (5) الممثل للأمواج المتبعثرة يأخذ الشكل :

$$G_{(+)} (r|r') = - \frac{\exp (ik | r - r'|)}{4 \pi | r - r' |} \quad (7)$$

ونستطيع كتابة حل المعادلة (1) على الشكل :

$$\Psi_a(\mathbf{r}) = \varphi_a(\mathbf{r}) - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int \frac{\exp(ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}')\ \Psi_a(\mathbf{r}')\, d_3 r' \qquad (8)$$

وهي معادلة تكاملية تعطي التابع الموجي الكامل Ψ_a لمسألة التبعثر •

ففي حالة المسافات البعيدة $r >> d$ نستطيع أن نكتب

$$k\,|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \approx kr - (\mathbf{k}_b \cdot \mathbf{r}')$$

حيث $\mathbf{k}_b = \frac{k\mathbf{r}}{r}$ ويأخذ التابع $\Psi_a(\mathbf{r})$ الشكل التقاربي

$$\Psi_a(\mathbf{r}) = \varphi_a(\mathbf{r}) + A_{ba}\frac{e^{ikr}}{r} \quad ; \quad r >> d \qquad (9)$$

حيث

$$A_{ba} = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int e^{-i(\mathbf{k}_b \cdot \mathbf{r}')}\, V(\mathbf{r}')\ \Psi_a(\mathbf{r}')\ d_3 r' \qquad (10)$$

فإذا تذكرنا أن $\varphi_b = \exp(i\mathbf{k}_b\mathbf{r})$ هي الموجة المستوية الممثلة لحركة جسيم حر اندفاعه $\mathbf{P}_b = \hbar \mathbf{k}_b$ نستطيع كتابة المعادلة (10) بالشكل :

$$A_{ba} = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} < \varphi_b\,|\,\hat{V}\,|\,\Psi_a > \qquad (11)$$

ويدعى التابع A_{ba} سعة التبعثر ويتناسب مع الكتلة المختزلة μ ، كما يرتبط بطاقة الحركة النسبية وبالزاوية بين الشعاعين $\mathbf{k}_a$ و $\mathbf{k}_b$ وبكمون التبعثر • ويتضح من المعادلة (9) أنه من أجل المسافة البعيدة عن مركز التبعثر • يحدد التابع $\Psi_{sc} = A_{ba}\frac{e^{ikr}}{r}$ سعة التبعثر بشكل كامل •

يعبر عن التبعثر عادة بالمقطع الفعال التفاضلي $d\sigma(\theta, \varphi)$ ويمثل النسبة بين عدد الجسيمات المتبعثرة خلال واحدة الزمن ضمن عنصر الزاوية المجسمة $d\Omega$ ، الى كثافة تدفق الجسيمات الواردة • ففي ثانية واحدة يعبر عدد من الجسيمات قدره $j_r r^2 d\Omega$ العنصر السطحي $r^2 d\Omega$ حيث تعطى كثافة التدفق وفق اتجاه شعاع الموضع بالعلاقة :

$$j_r = \frac{\hbar}{2\mu i}\left[\Psi^*_{sc}\frac{\partial \Psi_{sc}}{\partial r} - \Psi_{sc}\frac{\partial \Psi^*_{sc}}{\partial r}\right] = \frac{\hbar k}{\mu r^2} \mid A_{ba}(\theta, \varphi) \mid^2$$

وذلك باستخدام العلاقة (4) • وبناء عليه تعطى العلاقة بين المقطع التفاضلي الفعال للتبعثر وبين سعة التبعثر بالصيغة

$$d\sigma = \frac{j_r r^2 d\Omega}{\mid j_a \mid} = \frac{k}{k_a} \mid A_{ba} \mid^2 d\Omega \qquad (12)$$

ففي حالة التبعثر المرن لدينا $k = k_a$ •

أي أن المقطع الفعال التفاضلي يتحدد بصورة وحيدة بسعة التبعثر A_{ba} •

ولحساب سعة التبعثر من المعادلة (11) يجب معرفة حل المعادلة التكاملية (8) فإذا نظرنا الى كمون التأثير المتبادل $V(r)$ كإضطراب صغير ، نستطيع حل المعادلة (8) مستخدمين طريقة التقريب المتتالي فنجد :

$$\Psi_a(r) = \varphi_a(r) - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int \frac{e^{ik\mid r-r'\mid}}{\mid r - r'\mid} V(r')\,\varphi_a(r')\, d_3 r' + \ldots \quad (13)$$

بتعويض (13) في المعادلة (11) نجد النشر السلسلي لسعة التبعثر

$$A_{ba} = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} < \varphi_b |V| \varphi_a > +$$

$$+ \left(\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\right)^2 \int \varphi_b^*(r) \frac{e^{ik|r-r'|}}{|r-r'|} V(r) V(r') \varphi_a(r') d_3 r d_3 r' + \ldots$$

اذا تقاربت هذه السلسلة وأبقينا N حداً منها نحصل على مايدعى بتقريب بورن من المرتبة N • وبصورة خاصة يأخذ تقريب بورن من المرتبة الاولى الشكل

$$A_{ba}^{(B)} = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} < \varphi_b |V| \varphi_a > \qquad (14)$$

بتعويض العلاقة (14) في العلاقة (12) نحصل على المقطع الفعال التفاضلي للتبعثر المرن ضمن تقريب بورن من المرتبة الاولى .

$$d\sigma^{(B)} = \left(\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\right)^2 | < \varphi_b |V| \varphi_a > |^2 d\Omega \qquad (14')$$

أي يجب تبديل Ψ_a في المعادلة (11) بالموجة الواردة φ_a عند حساب سعة التبعثر في تقريب بورن من المرتبة الاولى •

لندرس الآن حدود استخدام هذا التقريب • يتضح من المعادلة (13) أن تبديل بـ Ψ_a φ_a في المعادلة (11) يصح عند تحقق المتراجحة

$$|\varphi_a(r)| >> \left| \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|r-r'|}}{|r-r'|} V(r') \varphi_a(r') d_3 r' \right|$$

يكون $V(r)$ كبيراً ضمن مجال التبعثر ويأخذ قيمته العظمى من أجل

$r = 0$ فإذا وضعنا $\varphi_a(r)$ في المتراجحة السابقة وعوضنا عن $r = 0$ بصيغتها فنحصل على الشرط العام لتطبيق تقريب بورن وهو

$$\left| \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int \frac{V(r)}{r} \exp i\,[\,kr + (\mathbf{k}_a \cdot \mathbf{r})\,]\, d_3\mathbf{r} \right| << 1 \qquad (15)$$

فمن أجل قيم صغيرة لطاقة الحركة النسبية $(kd << 1)$ نستطيع استبدال الواحد بالتابع الأسي في العلاقة (15) فتصبح من الشكل

$$2\mu d^2 \overline{V} << \hbar^2 \qquad (15')$$

حيث $\overline{V} = \frac{1}{4\pi d^2} \left| \int \frac{V(r)}{r} d_3\mathbf{r} \right|$

واستناداً الى علاقة الشك ، فإن المقدار $\frac{\hbar^2}{2\mu d^2}$ يميز الطاقة الحركية لجسيم ضمن مجال وحيد البعد طوله d ، وبالتالي فإن المتراجحة تشير الى ضرورة كون الطاقة الحركية للجسيم أكبر بكثير من الطاقة الكامنة . إذا كانت الطاقة الكامنة متناظرة كروياً نستطيع اجراء المكاملة في العلاقة (15) على المتحولات الزاوية . لذلك نختار المحور Z باتجاه $\mathbf{K}_a$ ، كما أن $K = |\mathbf{K}_a|$ ، ونكامل فنتوصل الى الشرط اللازم لتطبيق تقريب بورن بالنسبة لكمون متناظر كروياً أي

$$\mu \left| \int_0^\infty V(r)\,[\,e^{2ikr} - 1\,]\, dr \right| << k\hbar^2 \qquad (16)$$

وفي حالة قيم كبيرة لطاقة الحركة النسبية $(kd >> 1)$ يتلاشى إسهام الحد الأسي ويصبح الشرط (16) من الشكل $\mu \overline{V} d^2 << k\hbar^2 d$

حيث $\bar{V} = d^{-1} \left| \int_0^\infty V(r)\, dr \right|$

وفي حالة القيم الصغيرة لطاقة الحركة النسبية $(kd << 1)$ نستطيع نشر الحد الأسي في العلاقة (16) • وبإبقاء الحدين الأولين في ذلك النشر نتوصل الى العلاقة $2 \mu d^2 \bar{V} << \hbar^2$ نفسها التي سبق ذكرها •

لننظر الى صلاحية استخدام تقريب بورن من أجل بعض أنواع الطاقة الكامنة:

أ ـ الكمون الأسي : $V(r) = V_0 \exp(-r/r_0)$

لدينا في هذه الحالة :

$$\int_0^\infty V(r)\left[e^{2ikr} - 1 \right] dr = - \frac{2 V_0 i K r_0^2}{2 i K r_0 - 1}$$

ويصبح الشرط (16) من الشكل :

$$2 \mu V_0 r_0^2 << \hbar^2 \sqrt{1 + 4 K^2 r_0^2}$$

فإذا كان $K r_0 << 1$ تأخذ المتراجحة الشكل $2 \mu V_0 r_0^2 << \hbar^2$

أما إذا كان $K r_0 >> 1$ فنجد $\mu V_0 r_0 << K \hbar^2$

ب ـ الكمون الكولوني المحجوب : $V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \exp(-r/r_0)$

ليكن $a = \frac{1}{r_0}$

لحساب التكامل $I = \int_0^\infty e^{-ar} \left[e^{2ikr} - 1 \right] \frac{dr}{r}$

نشتقه بالنسبة للمعامل a فنجد

$$\frac{\partial I}{\partial a} = -\int_0^{\infty} e^{-ar} [e^{2ikr} - 1] dr = \frac{1}{a} - \frac{1}{a - 2ik}$$

نكامل بالنسبة لـ a فنجد :

$$I = ln\, a - ln\,(a - 2ik) + c$$

إن $I = 0$ عندما $a \to \infty$ أي أن $c = 0$ ومنه :

$$I = -ln\,(1 - 2ikr_0) = -ln\sqrt{1 + 4k^2 r_0^2} + i\Phi$$

حيث $\Phi = 2kr_0$ ويصبح الشرط (16) من الشكل :

$$\mu z_1 z_2 e^2 \; [(ln\sqrt{1 + 4k^2 r_0^2} + \Phi^2]^{1/2} << k\hbar^2$$

لاتتجاوز قيمة Φ المقدار $\pi/2$ ، كما تتغير قيمة الحد اللوغاريتمي تغيراً طفيفاً مع تغير نصف قطر الحجب r_0 : ، وبالتالي نستطيع كتابة الشرط (16) لهذه الحالة بالشكل :

$$z_1 z_2 e^2 << \hbar v \qquad (17)$$

حيث $v = \frac{\hbar k}{\mu}$ هي السرعة النسبية للجسمين المتصادمين

جـ ـ البئر الكموني المربع : $V(r) = -V_0$ من أجل $r \leqslant d$ و $V(r) = 0$ من القيم الأخرى لـ r تأخذ المتراجحة (16) في هذه الحالة الشكل

$$\frac{\mu}{k\hbar^2} \left| \int_0^d V_0 \left[e^{2ikr} - 1 \right] dr \right| =$$

$$= \frac{\mu V_0}{k^2 \hbar^2} \left\{ \sin^2 kd + kd \left[kd - \sin 2 kd \right] \right\}^{1/2}$$

$$\simeq \frac{\mu V_0}{k^2 \hbar^2} << 1$$

وبما أن $2E = \frac{k^2 \hbar^2}{\mu}$ حيث E هي طاقة الحركة النسبية ، فإننا نكتب هذه المتراجحة بالشكل

$$V_0 << 2E \qquad (18)$$

من المعروف في الفيزياء النووية أننا نستطيع وصف التبعثر المرن للنترونات من قبل نوى الذرات باستخدام بئر كموني شدته $V_0 \cong 50$ MeV ومجال تأثيره $d = 1.3 \times A^{1/3}$ fm حيث A هو العدد الكتلي للنواة . أي أننا نستطيع استخدام تقريب بورن لدراسة تبعثر النترونات من قبل نوى العناصر إذا حققت طاقة الحركة النسبية المتراجحة .

$$E >> 25 \text{ MeV} \qquad (19)$$

وتكون سعة التبعثر في هذه الحالة $\Psi_a \to \varphi_a = e^{i k_a \cdot r}$ استناداًالى العلاقة (10) من الشكل

$$A_{ba}^{(B)}(q) = - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int e^{i q \cdot r} V(r) \, d_3 r \qquad (20)$$

حيث $\hbar q = \hbar (k_a - k_b)$ هو الاندفاع المنتقل في عملية التبعثر .

تسمح العلاقة (20) بالتفسير البسيط التالي : تسهم كل وحدة حجم في سعة التبعثر بالمقدار $e^{i\,q\cdot r}\;(\mu/2\pi\hbar^2)\;V(r)$ ويحدد العامل $e^{i\,q\cdot r}$ الانزياح الطوري للموجة المتبعثرة بواسطة عنصر الحجم عند r بالنسبة للموجة المتبعثرة بواسطة عنصر الحجم عند $r = 0$ • فاذا كان لـ $V(r)$ الاشارة نفسها خلال التبعثر الجبهي $(q = 0)$ فكل العناصر الحجمية تسهم محافظة على الطور نفسه وتأخذ سعة التبعثر قيمتها العظمى $A^{(B)}_{ba}(0) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int V(r)\,d_3 r$

وتكون اسهامات العناصر الحجمية المختلفة وفق الاتجاهات الاخرى مختلفة في الطور • ويمكن أخذ أثر تداخل الامواج المتبعثرة من قبل العناصر الحجمية بعين الاعتبار بحساب النسبة $F_q = \frac{A^{(B)}_{ba}(q)}{A^{(B)}_{ab}(0)}$ والتي تدعى عادة بعامل الشكل (Form factor) •

٢ ــ نظرية التبعثر المرن وفق تقريب بورن :

يمكن معالجة تبعثر الجسيمات عند اصطدامها كانتقالات كمومية ،ضمن حالات الطيف المستمر ، من حالة ابتدائية تقابل حركة حرة اندفاعها $p_a = \hbar k_a$ الى حالة نهائية اندفاعها $p_b = \hbar k_b$ ، تحت تأثير مؤثر اضطراب $\hat{V}(r)$ يحدد الطاقة المتبادلة بين الجسمين المتصادمين • سنبرهن أن احتمال مثل هذا الانتقال محسوباً باستخدام نظرية الاضطراب من المرتبة الاولى ماهو إلا تقريب بورن من المرتبة الأولى في نظرية التبعثر •

اذا مثلنا الحالة الابتدائية للموجة المستوية بالعلاقة :

$$\varphi_a = e^{i(k_a \cdot r)} \qquad (21)$$

منظمة على شكل جسيم واحد في واحدة الحجم • وكذلــك الامر بالنسبة للحالة النهائيــة •

$$\varphi_b = e^{i(k_b \cdot r)} \qquad (22)$$

عندها نحصل على احتمال الانتقال من الحالة φ_a الى الحالة φ_b حسب نظرية الاضطراب في التقريب من المرتبة الاولى

$$dp_{ba} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| < \varphi_b | V | \varphi_a > \right|^2 d\rho \qquad (23)$$

حيث

$$d\rho = \frac{\mu^2 v_b^2 \, d\Omega}{(2\pi\hbar)^3} \qquad (24)$$

هو عدد الحالات النهائية ضمن واحدة الحجم تكون فيها الاندفاعات موجهة ضمن الزاوية المجسمة $d\Omega$ و v_b هي السرعة النسبية للجسيم في الحالة النهائية •

إذا قسمنا احتمال الانتقال (23) على كثافة التدفق للجسيمات الواردة والتي تساوي القيمة العددية للسرعة v_b •ثم استخدمنا العلاقة (24) نحصل على المقطع الفعال التفاضلي ضمن عنصر الزاوية المجسمة $d\Omega$ •

$$d\sigma = \frac{dp_{ba}}{v_a} = \frac{\mu^2 v_b}{(2\pi\hbar^2)^2 v_a} \left| < \varphi_b |V| \varphi_a > \right|^2 d\Omega \qquad (25)$$

وفي حالة التبعثر المرن لدينا $v_a = v_b$ وبذلك ترد المعادلة (25) الى المعادلة

(14) التي حصلنا عليها باستخدام تقريب بورن من المرتبة الأولى •

عند استخدام الصيغ الصريحة للتوابع الموجية نستطيع كتابة مصفوفة الانتقال بالشكل :

$$<\varphi_b |V| \varphi_a> = \int V(\mathbf{r})\, e^{i(\mathbf{k}_a \cdot \mathbf{r} - \mathbf{k}_b \cdot \mathbf{r})}\, d_3\mathbf{r} \equiv V(\mathbf{k}_b - \mathbf{k}_a) \quad (26)$$

أي أن عنصر المصفوفة الذي يحدد المقطع الفعال ماهو إلا تحويل فورييه الكمون المقابل للاندفاع المنتقل خلال التبعثر • وفي حالة التبعثر المرن لدينا

$$|\mathbf{k}_b| = |\mathbf{k}_a| = \mathbf{k} \quad ; \quad |\mathbf{k}_b - \mathbf{k}_a| = 2\,\mathbf{k}\sin\frac{\theta}{2} \qquad (27)$$

حيث θ هي زاوية التبعثر • أي ان احتمال التبعثر وفق زاوية قدرها θ مرتبط باحتمال انتقال اندفاع قدره $\Delta p = 2\hbar k \sin\theta/2$ • فإذا كان الكمون متناظراً كروياً ، نستطيع مكاملة العلاقة (26) بالنسبة للمتحولات الزاوية فنجد:

$$V(k_b - k_a) = \frac{4\pi}{|\mathbf{k}_b - \mathbf{k}_a|} \int_0^\infty V(\mathbf{r})\, \mathbf{r} \sin(|\mathbf{k}_b - \mathbf{k}_a|\, \mathbf{r})\, dr \qquad (28)$$

وفي هذه الحالة يرتبط تحويل فورييه للكمون بالقيمة المطلقة للاندفاع المنتقل ويصبح المقطع الفعال التفاضلي للتبعثر المرن من الشكل

$$d\sigma = \frac{\mu^2}{(2\pi\hbar^2)^2} \left| V\left(2\,k\sin\frac{\theta}{2}\right)\right|^2 d\Omega \qquad (28')$$

إذا كان $V(\mathbf{r})$ زوجياً تكتب العلاقة (28) بالشكل :

$$V(\mathbf{k}_b - \mathbf{k}_a) = \frac{2\pi}{i\,|\mathbf{k}_b - \mathbf{k}_a|} \int_{-\infty}^{\infty} V(\mathbf{r})\, e^{i\mathbf{r}\cdot(\mathbf{k}_b - \mathbf{k}_a)}\, \mathbf{r}\, dr \quad (28'')$$

سنقوم الآن بحساب المقاطع الفعالة التفاضلية للتبعثر المرن في حالة توابع كمون بسيطة .

اـ حقل كولون المحجوب : $V(r) = \frac{z_1 z_2 e^2}{r} \exp(-r/r_0)$

في هذه الحالة لدينا :

$$V(|\mathbf{k}_b - \mathbf{k}_a|) = \frac{4\pi z_1 z_2 e^2}{|\mathbf{k}_b - \mathbf{k}_a|^2 + \frac{1}{r_0^2}}$$

باستخدام العلاقة (27) وتعويضها بالعلاقة (28) نجد :

$$d\sigma = \left[\frac{2\mu\, z_1 z_2\, e^2}{4p^2 \sin^2(\theta/2) + \hbar^2/r_0^2} \right]^2 d\Omega \qquad (29)$$

نجعل $r_0 \to \infty$ يتلاشى أثر الحجب وتأخذ المعادلة (29) الشكل

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left[\frac{\mu z_1 z_2 e^2}{2p^2 \sin^2(\theta/2)} \right]^2 = \left[\frac{z_1 z_2 e^2}{2\mu v^2 \sin^2(\theta/2)} \right]^2$$

وهي علاقة رزرفورد المعروفة حيث v هي السرعة النسبية .

بمقارنة العلاقة (29) مع العلاقة (28) نجد أن حجب الحقل الكولوني لايؤثر على التبعثر المرن من أجل الزوايا التي تحقق المتراجحة $\theta > \theta_0$ وتحسب θ_0 من العلاقة $2 p r_0 \sin \theta/2 = \hbar$ ، تتغير مقاطع التبعثر ببطء في الحالة $\theta < \theta_0$ لتأخذ قيمة محدودة من أجل $\theta = 0$.

ب ـ الكمون الغاوصي : $V(r) = V_0\ e^{-r^2/2r_0^2}$

هو تابع زوجي ويعطي

$$V(|\mathbf{k}_b - \mathbf{k}_a|) = (2\pi)^{3/2} r_0^3\ V_0 \quad \exp\left[-\frac{1}{2}(\mathbf{k}_b - \mathbf{k}_a)^2\ r_0^2\right]$$

وبناء عليه يكون المقطع الفعال التفاضلي للتبعثر مساوياً

$$d\sigma = \frac{2\pi\mu^2 r_0^6\ V_0^2}{\hbar^2} \exp\left[-4k^2\ \ r_0^2\ \sin^2(\theta/2)\right]\ d\Omega \qquad (30)$$

يتناقص المقطع الفعال التفاضلي للتبعثر في هذه الحالة بازدياد زاوية التبعثر.

جـ ـ البئر الكروي : $V(r) = -V_0$ من أجل $r < r_0$

$V(r) = 0$ من أجل $r > r_0$

إن تابع الكمون في هذه الحالة هو تابع زوجي أيضاً ويعطي

$$V(\mathbf{k}_b - \mathbf{k}_a) = \frac{4\pi V_0}{|\mathbf{k}_b - \mathbf{k}_a|^2}\left\{ r_0 \cos(|\mathbf{k}_b - \mathbf{k}_a|\, r_0) - \right.$$

$$\left. - \frac{\sin(|\mathbf{k}_b - \mathbf{k}_a|\, r_0)}{|\mathbf{k}_b - \mathbf{k}_a|} \right\} \qquad (31)$$

بتعويض العلاقة (31) في العلاقة (28) نحصل على المقطع الفعال التفاضلي

للتبعثر يتميز المقطع الفعال التفاضلي للتبعثر المرن بواسطة كمون بئر كروي باهتزاز قيمه مع تغير زواية التبعثر في حالة طاقات نسبية عالية ، أما من أجل طاقات نسبيــة صغيرة أي من أجل $\xi = k r_0 << 1$ ، نستطيع نشر المقطع الفعال التفاضلي وفق سلسلة قوى ξ ونرى ان المقطع الفعال التفاضلي للتبعثر المرن مستقل عن زاوية التبعثر من أجل حدود أقل مرتبة من ξ^2 ، وهي خاصة عامة تتمتع بها جميــع الكمونات ذات المدى المحدود ، أي أننا لانستطيع تمييز شكل كمون عن آخــر باستخدام تبعثر مرن لجسيمات بطيئة .

٣ ـ طريقة الامواج الجزئية في طريقة التبعثر :

عندما يكون كمون الحقل المسبب للتبعثر ، متناظراً كروياً ، يكون الاندفاع الزاوي أحد ثوابت الحركة ، وبتعبير آخر تسهم الحالات المقابلة لقيم مختلفة من قيم الاندفاع الزاوي ، بصورة مستقلة في التبعثر ، لذلك فمن الملائم كتابة الامواج القادمة كتراكب لامواج جزئية يقابل كل منها قيمة معينة من قيم الاندفــاع الزاوي سنختار المحور z من جملتنا الاحداثية منطبقاً على اتجــاه الاندفــاع للامواج القادمة فنكتب :

$$\varphi_a(r) = e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)\, i^l j_l(kr)\, P_l(\cos\theta), \qquad (32)$$

حيث $j_l(kr)$ هي توابع بسل الكرويــة ، متذكــرين الشكل التقاربي لتوابع بسل

$$j_l(kr) \simeq \frac{\sin(kr - l\pi/2)}{kr} \quad ; \quad kr >> 1$$

نستطيع كتابة العلاقة (32) بالشكل :

$$\varphi_a(r) \approx (kr)^{-1} \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1)\, i^l P_l(\cos\theta)\, \varrho_l(r), \qquad (32')$$

حيث :

$$\rho_l(r) = \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) = \frac{1}{2} i \left[e^{-i(kr - \frac{l\pi}{2})} - e^{i(kr - \frac{l\pi}{2})} \right] \qquad (33)$$

يمثل الحد الأول من العلاقة (33) أمواجاً كروية قادمة ، ويمثل الحد الثاني أمواجاً كروية مبتعدة أي أن هناك موجتين كرويتين احداهما مبتعدة والأخـرى مقتربة ، تقابلان كل موجة جزئية في المعادلة (32) عند المسافات البعيدة • إذن يجب علينا أن نبحث عن حل للمعادلة (1) يحدد تبعثر الجسيمات ضمن حقـل كمون متناظر كروياً وله مجال محدد $V(r)$. نستطيع كتابة هــذا الحل على شكل تراكب أمواج جزئية من الشكل

$$\psi(r) = (kr)^{-1} \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1)\, i^l R_l(r)\, P_l(\cos\theta). \qquad (34)$$

نجد بالتحول الى الاحداثيات القطبية الكروية وتعـويض الحـل (34) في المعادلة (1) :

$$\left(\frac{d_2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2\right) R_l(r) = \frac{2\mu V(r)}{\hbar^2} R_l(r) \qquad (35)$$

يجب أن يكون التابع (34) محدوداً عند $r = 0$ وبالتالي يجب أن يحقق $R_l(r)$ الشرط الحدي

$$R_l(0) = 0 \qquad (36)$$

فإذا لم يكن الكمون $V(r)$ أسرع تغيراً من $\frac{1}{r}$ عندما $r \to 0$ تصبح

المعادلة (35) في الحالة $r \to 0$ من الشكل

$$\left[\frac{d_2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] R_l(r) = 0$$

بالنظر إلى هذه المعادلة والى الشرط الحدي (36) تجد أن $R_l(r) \sim r^{l+1}$

عندما $r \to 0$ • نحن مهتمون بحلول المعادلة (35) التي تشكل تراكباً للقسم الموضعي (33) من الموجة الجزئية عند المسافات الكبيرة والتي تقابل العدد الكمومي l فيالموجتين القادمة والمبتعدة • يؤثر التفاعل بين الجسيمات القادمة وحقل التبعثر ، على سعة الموجة المتبعثرة في العلاقة (33) لذلك نستطيع كتابة الشكل المقارب لتابع الموضع $R_l(r)$ في العلاقة (35) كما يلي :

$$R_l(r) = \frac{1}{2} i \left[e^{-(kr - \frac{l\pi}{2})} - s_l e^{i(kr - \frac{l\pi}{2})} \right]$$

$$= \sin(kr - \frac{1}{2} l\pi) + \frac{1}{2} i(-i)^l (1 - s_l) e^{i(kr - \frac{l\pi}{2})} \qquad (37)$$

وذلك من أجل $kr >> 1$ •

تحدد الامثال s_l في العلاقة (37) تغير الامواج المبتعدة مرتبطة بطاقة الحركة النسبية ، وتدعى بالعناصر القطرية لمصفوفة التبعثر المقابلة للاندفاع الزاوي المداري l

تحدد بتعويض العلاقة (37) في المعادلة (34) واستخدام العلاقه (32)

$$\Psi(r) \simeq \varphi_a(r) + A(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \qquad kr >> 1$$

وإذا كتبنا سعة التبعثر $A(\theta)$ بدلالة عناصر مصفوفة التبعثر نجد :

$$A(\theta) = \frac{i}{2k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(1-S_l) P_l(\cos\theta) \qquad (38)$$

تحدد عناصر مصفوفة التبعثر s_l سعة التبعثر بشكل وحيد وهي أعداد عقدية ، ويمكن التعبير عن عناصر مصفوفة التبعثر ، في حالة التبعثر المرن بدلالة انزياحات الطور الحقيقية أو طور التبعثر δ_l من خلال العلاقة

$$s_l = e^{2i\delta_l} \quad \text{أو} \quad s_l - 1 = 2ie^{i\delta_l} \sin\delta_l \qquad (39)$$

وبما أن التابع الاسي في هذه العلاقة هو تابع دوري فلا تتحدد أطوار الانزياح بشكل وحيد . فإذا اشترطنا انعدام انزياح الطور عند تلاشي التفاعل $V(r)$ ، فيمكن لإنزياحات الطور أن تأخذ قيمتها في المجال $(0, \pi)$ أو في المجال $(-\pi/2, \pi/2)$ ولسوف نأخذ المجال الثاني .

إن توابع ليجندر تأخذ القيمة 1 من أجل $\theta = 0$ وبالتالي نحصل على علاقة بسيطة انطلاقا من (38) بين سعة التبعثر الجبهي $A(0)$ وعناصر مصفوفة التبعثر

$$A(0) = \frac{i}{2k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(1-S_l). \qquad (40)$$

ويكتب المقطع الفعال التفاضلي للتبعثر المرن ضمن عنصر الزاوية المجسمة $d\Omega$ بدلالة انزياحات الطور مستعينين بالمعادلتين (38) , (39) بالشكل

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |A(\theta)|^2 = k^{-2} \sum_{l,l'} (2l+1)(2l'+1) P_l(\cos\theta) P_{l'}(\cos\theta) \sin\delta_l \sin\delta_{l'} \cos(\delta_l - \delta_{l'}) \qquad (41)$$

بتكامل هذه العلاقة على جميع الزوايا واستخدام علاقة التعامد

$$\int p_l (\cos\theta)\, p_{l'} (\cos\theta)\, d\Omega = \frac{4\pi}{2l+1} \delta_{ll'}$$

نحصل على المقطع الفعال الكلي للتبعثر المرن

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l \qquad (42)$$

ويمكن كتابة المقطع الفعال الكلي كمجموع لمقاطع فعالة جزئية σ_l تشيرالى

قيمة محددة للعدد l $\sigma = \sum_{l=0} \sigma_l$ حيث

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l = \frac{\pi}{k^2} (2l+1) |1 - s_l|^2 \qquad (43)$$

يمكن عد العامل $(2l+1)$ في العلاقة (43) وزناً احصائياً للموجةالجزئية l أي إلى عدد الحالات التي تختلف بعددها الكمومي m .

نستنتج من العلاقة (43) أن أعظم قيمة للمقطع الفعال للتبعثر هي

$$(\sigma_l)_{max} = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \qquad (44)$$

وباستخدام العلاقة (39) نجد من العلاقة (38) أن الجزء التخيلي من سعة التبعثر الجبهي يعطى بالعلاقة

$$\operatorname{Im} A(0) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l .$$

بمقارنة هذه القيمة مع العلاقة (32) نجد أن المقطع الفعال الكلي للتبعثرالمرن مرتبط بالجزء التخيلي لسعة التبعثر الجبهي بالعلاقة البسيطة التالية

$$\sigma = \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} A(0) \qquad (45)$$

وهذا مايدعى بالنظرية الضوئية Optical Theorem .

إن طريقة الامواج الجزئية ملائمــة للاستخدام وخاصة في حالة الكمونــات قصيرة المدى مثل القوى النووية أو القوى بين الذرات المعتدلة ، وفي هذه الحالة تسهم القيم الصغيرة فقط من قيم l في تبعثر الجسيمات ذات الطاقــة الحركية المنخفضة ويمكننا إدراك هذا الامر من اعتبارات وصفية . فمن أجل مسافات كبيرة، r أكبر من المجال d ، ستؤثر القوة النابذة المركزية بطاقة قدرها $\frac{\hbar\, l(l+1)}{2\mu r^2}$ على الجسيم في الحالة الكمومية ذات العدد l وسيتحرك الجسيم عند المسافة r محققاً المتراجحة

$$\frac{\hbar^2\, l(l+1)}{2\mu r^2} \leqslant \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} = E \qquad (46)$$

حيث E هي طاقة الحركة النسبية . ونستطيع تسمية المسافة $r_{0_l} = \sqrt{l(l+1)}/k$ بأصغر مسافة اقتراب . إذا كان $r < r_{0_l}$ يكون احتمال مشاهدة الجسيم صغيراً واذا كان المجال a أصغر من r_{0_l} فإن الموجة الجزئية المقابلة لن تصل الى مجال التأثير ولن تسهم في التبعثر ، وبنــاء عليــه فإن الأمواج الجزئية ذات الاعــداد الكمومية l المحققة للمتراجحة

$$kd < \sqrt{l(l+1)} \qquad (47)$$

لن تسهم بصورة عملية في التبعثر .

تربط العلاقة (43) بين المقطع الفعال الكلي وزاوية انزياح الطور δ_l ،

وهكذا نجد أنه لابد من حساب δ_l .

يعطى التابع R_l بالمعادلة :

$$\frac{d_2 R_l}{dr^2} + [k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2\mu V(r)}{\hbar^2}] R_l = 0$$

وبالشرط الحدي $R_l(0) = 0$

كما يتعين موضع الجسيم الحر بالمعادلة :

$$\frac{d_2 g}{dr^2} + [k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}] g_l = 0$$

وبالشرط الحدي $g_l(0) = 0$

فإذا ضربنا المعادلة الاولى بـ g_l والثانية بـ R_l وطرحنا الثانية من الاولى ثم كاملنا من الصفر الى ρ نجد :

$$[g_l \frac{dR_l}{dr} - R_l \frac{dg_l}{dr}]_{r=\rho} = \frac{2\mu}{\hbar^2} \int_0^\rho V(r) R_l \, g_l \, dr \qquad (48)$$

إن حل معادلة الجسيم الحر هو :

$$g_l(r) = k r j_l(kr) \qquad (49)$$

حيث $j_l(kr)$ هو تابع بسل . فإذا اخترنا ρ كبيرة لدرجة كافية فـإن الحل g_l يأخذ شكله التقاربي $g_l(r) = \sin(kr - l\pi/2)$ من أجل $kr >> l$

وعندهـا نبحث عن شكل تقاربي للتابع R_l فنجد

$$R_l(r) = \sin(kr - l\pi/2 + \delta_l) \qquad (50)$$

بتعويض الصيغ التقاربية لكل من g_l و R_l في الطرف الايسر من المعادلـة (48) نحصل على معادلة تعطينا δ_l بدلالة الحل R_l أي :

$$k \sin \delta_l = -\frac{2\mu}{\hbar^2} \int_0^{\rho} V(r) R_l(r) g_l(r)\, dr \qquad (51)$$

وللحصول على قيمة تقريبية لانزياح الطور δ_l يمكننا استبدال بـ R_l في العلاقة (51) g_l نجد :

$$k \sin \delta_l \cong -\frac{2\mu k^2}{\hbar^2} \int_0^{\rho} V(r) j_l^2(kr) r^2\, dr \qquad (52)$$

إذا رمزنا لمجال تأثير الكمون بـ d وكان $kd << 1$ نستطيع استخدام القيمة المقاربة لتابع بسل $j_l(kr) = \frac{(kr)^l}{1,3,5\ldots(2l+1)}$ وتصبح المعادلة (52) من الشكل :

$$\sin \delta_l = -\frac{2\mu (kd)^{2l+1}}{\hbar^2 [1.3.5\ldots(2l+1)]^2} \int_0^{d} V(r) \left(\frac{r}{d}\right)^{2l+1} r\, dr \qquad (53)$$

وهي حالة الجسيمات البطيئة • توضح العلاقة (53) مع العلاقة (47) أن الموجة s $(l = 0)$ هي التي تسهم فقط في تبعثر الجسيمات البطيئة لذلك سندرس تبعثر الموجة s فقط وهذا يعني حل المعادلة :

$$\left(\frac{d_2}{dr^2} + k^2 \right) R_0(r) = \frac{2\mu V(r)}{\hbar^2} R_0(r) \qquad (54)$$

الخاضعة للشرط $R_0(0) = 0$.

إن الشكل المقارب للحل هو :

$$R_0(r) = c \sin(kr + \delta_0) \qquad (55)$$

ولسوف نناقش بعض الأمثلة البسيطة .

٤ ـ التبعثر المرن للجسيمات البطيئة :

ا ـ التبعثر بواسطة بئر كموني كروي : $V(r) = -V_0$ من أجل $r \leqslant d$

$V(r) = 0$ من أجل $r > d$

وهو بئر جاذب . إن الحل (55) يحقق المعادلة (54) خارج البئر أما داخل البئر فتأخذ المعادلة (54) الشكل :

$$\left(\frac{d_2}{dr^2} + \bar{k}^2 \right) R_{01}(r) = 0 \quad ; \quad R_{01}(0) = 0 \qquad (56)$$

حيث :

$$\bar{k}^2 = k^2 + k_0^2 \quad ; \quad k_0^2 = \frac{2\mu V_0}{\hbar^2} \qquad (57)$$

يحقق التابع $R_{01}(r) = c_1 \sin \bar{k} r$ المعادلة (56) وبما أننا مهتمون بانزياح الطور فقط سنطابق بين المشتق اللوغاريتمي للحلين عند $r = d$ أي :

$$k \operatorname{cotg}(kd + \delta_0) = \bar{k} \operatorname{cotg} \bar{k} d \qquad (58)$$

فإذا استخدمنا الرمز $D^{-1} = \bar{k} \cot g \bar{k} d$ للمشتق اللوغاريتمي للتابع الموجي في المجال الداخلي عند النقطة $r = d$ فإننا نجد من المعادلة (58) أن

$$\tan \delta_0 = \frac{KD - \tan kd}{1 + KD \tan kd} \qquad (59)$$

أو :

$$\delta_0 = \tan^{-1}(KD) - kd \qquad (60)$$

ونهتم عادة بالقيمة الأساسية للانزياح ضمن المجال $-\pi/2 \leqslant \delta_0 \leqslant \pi/2$ فمن أجل قيم صغيرة لطاقة الحركة النسبية نكتب $\tan kd \simeq kd + \frac{(kd)^3}{3} + \ldots$ وتأخذ العلاقة (59) الشكل البسيط

$$\tan \delta_0 = \frac{(K(D - d - \frac{(kd)^3}{3k})}{1 + K^2 Dd}$$

واذا تحققت المتراجحتان $kd << 1$, $K^2 Dd << 1$ في آن واحد يمكننا تبسيط العلاقة السابقة لتصبح

$$\tan \delta_0 \simeq k(D - d) = kd\left[\frac{\tan \bar{k} d}{\bar{k} d} - 1\right] \qquad (61)$$

ويعطى المقطع الفعال الكلي بالعلاقة

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0 \simeq 4\pi \quad (D - d)^2 = 4\pi d^2 \quad \left[1 - \frac{\tan \bar{k} d}{\bar{k} d}\right] \qquad (62)$$

ب ـ التبعثر بواسطة حاجز كموني كروي : $V(r) = V_0$ من أجل $r \leqslant d$

$V(r) = 0$ من أجل $r > d$

أثبت أن $$\sigma_0 = 4\pi d^2 \left[\frac{\tanh \bar{k}_0 d}{\bar{k}_0 d} - 1\right]^2$$

ج ـ التبعثر بواسطة كرة صلبة : $V(r) = \infty$ من أجل $r \leqslant d$

$V(r) = 0$ من أجل $r > d$

أثبت أن $\sigma \cong 4\pi d^2$ في الحالة $kd << 1$

$\sigma \cong 2\pi d^2$ في الحالة $kd >> 1$

★ ★ ★

الفصل الثامن

الطرائق التقريبية في دراسة البنيه الذرية

الطرائق التقريبية في دراسة البنية الذرية

يمكننا التوصل الى الحالة الأساسية والحالات المثارة لذرة الهيدروجين بصورة تحليلية وذلك بحل معادلة شرودينغر وايجاد التوابع الموجية والقيم الذاتية ، كما نستطيع باستخدام طريقة المتغيرات التوصل الى التوابع الموجية والقيم الذاتية (سويات الطاقة) لذرة الهليوم وبعض الذرات الخفيفة الأخرى • سندرس في هذه الفقرة بعض الطرائق التقريبية المستخدمة في وصف الذرات الثقيلة •

١ ـ طريقة الحقل المركزي :

هي نقطة البداية في الحساب لجميع الذرات باستثناء الذرات الخفيفة• نفترض في طريقة الحقل المركزي أن كل الالكترون يتحرك ضمن كمون متناظر كروياً $V(r)$ ناتج عن النواة وعن باقي الالكترونات ، وهي فرضية جيدة عندما يكون الانحراف عن التابع $V(r)$ (الانحراف الذي يسببه مرور الالكترونات الاخرى بجوار الالكترون المدروس) صغيراً نسبياً ، وهذا هو واقع الحال لأن كمون النواة أكبر بـ z مرة من الانحراف الذي يسببه الالكترون المجاور فهو يتناسب عكساً مع المسافة الفاصلة ويتغير ببطء • ولابد من التصدي لمشكلتين رئيسيتين هما حساب الحقل المركزي ثم تصحيح النتائج المترتبة على استخدامه • وقبل أن نبدأ بمعالجة هاتين المشكلتين سنتعرف على الخواص العامة للحقل المركزي • يكون للطاقة الكامنة $V(r)$ في الذرة المعتدلة شكل تابع كولون $-\frac{e^2}{r}$ عند المسافات البعيدة عن النواة لأن نزع الالكترون المدورس يترك خلفه أيوناً مشحوناً بشحنة موجبة تساوي شحنة الالكترون ، ففي ذرة الهيدروجين تأخذ الطاقة الكامنة القيمة

$-\frac{e^2}{r}$ من أجل جميع قيم r وتعطي عدداً لانهائيا من سويات الطاقة المرتبطة المميزة بالاعداد الكمومية n, l, m • لذلك فإننا نتوقع وجـود عدد لانهائي مـن سويات الطاقة المرتبطة بالكمون $V(r)$ • وبسبب صغر التابع الموجي للالكترون بجوار النواة، في حالة قيم كبيرة للعدد n ، يكون اسهام شكل التابع $V(r)$ ، بعيداً عن النواة، هو الاسهام الاساسي • وإن أحد الفوارق الهامة، بين حالات ذرة الهيدروجين والحالات الناتجة من استخدام $V(r)$ للذرات الثقيلة، هو ازالة الانطباق بين الحالات التي لها العدد الكمومي n نفسه ولها قيم مختلفة للعـدد الكمومي l ، والتي كانت منطبقة في ذرة الهيدرجين • ويرجع ازالة الانطباق الى امكان اقتراب الالكترونات ذات الاعداد الكمومية الرئيسية الصغيرة (n) مـن النواة وبالتالي يصبح التابع $V(r)$ أقوى (أكثر سلبيـة) مـن $-\frac{e^2}{r}$ لأن النواة تكون أقل حجباً من قبل الالكترونات الاخرى • لذلك تملك الحالة المقابلة لأخفض قيمة من قيم العدد الكمومي l طاقة أقل من جميع الحالات التي لها العدد الكمومي الرئيسي n نفسه وتختلف عن بعضها بعضاً بالعـدد l • ولاتتأثر حالة الانطباق بالنسبة للعدد الكمومي m لأن التابع $V(r)$ متناظر كـروياً • وبالطبع نحتاج إلى عدد كمومي رابع لتعيين حالة الالكترون وهو السبن أي أننا نحتاج الى الأعداد n ، l ، m_l ، m_s • فالاعداد l و m_l تقابل العددين l و m في ذرة الهيدرجين أما $(m_s = \mp 1/2)$ فتعين توجه السبن • يتحدد عدد العقد للتابع الموجي في ذرة الهيدروجين بالعلاقة $n - l - 1$ وينطبق هذا الامر عند استخـدام تقريب الحقل المركزي أي أن l لاتتجاوز القيمة $n - 1$.

٢ ـ دورية العناصر :

ينص مبدأ باولي على عدم وجود الكترونين في الحالة الكمومية ذاتها أي لا يمكن

لالكترونين في الذرة نفسها أن يكون لهما الاعداد الكمومية الاربعة نفسها فمع ازدياد العدد الذري z تتوضع الالكترونات بحيث تملأ الحالات ذات الطاقة المنخفضة أولاً • فالحالة الاساسية للذرة ، في تقريب الحقل المركزي، تقابل توضعاً الكترونياً لاتشغل فيه سوية عليا قبل ملء جميع السويات الأدنى منها • وبسبب الانطباق للعددين m_l و m_s يمكن للطبقة المحددة بالعددين n و l أن تحوي $2(2l + 1)$ الكتروناً ، ويتضح أن تشكيل الحالة الاساسية للالكترونات في ذرة مايمكن ان يوصف بتحديد عدد الالكترونات في كل طبقة ، ففي التقريب المسمى بتقريب الحقل المركزي تملأ جميع الطبقات ماعدا الطبقة ذات الطاقة العليا فيمكن أن تكون ممتلئة كلياً أو جزئياً •

تتحدد معظم الخواص الكيميائية للذرات بالالكترونات الموجودة في آخر طبقة وتدعى بالكترونات التكافؤ ، والعامل الرئيسي هنا هو عدد حالات الالكترون المشغولة والخالية في هذه الطبقة ، وكذلك فجوة الطاقة بين هذه الطبقة والطبقة التي تليها والتي تكون خالية من الالكترونات ففي الذرة التي تكون فيها الطبقة الأخيرة ممتلئة وتكون الفجوة بين هذه الطبقة والطبقة الخالية التي تليها كبيرة ، تميل الى العطالة الكيميائية • يمثل العدد الرئيسي n بعدد ، والعدد الكمومي الثانوي l بحرف ، وعدد الالكترونات في الطبقة بدليل عددي وفق مايلي :

$$l = 0, 1, 2, 3, 4, 5, \ldots$$

$$s, p, d, f, g, h, \ldots$$

$$2(2l + 1) = 2, 6, 10, 14, 18, 22, \ldots$$

تمثل الحالة الاساسية لذرة الصوديوم (Z = 11) ولـذرة الزئبق (Z = 80) مثلاً :

$Na : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$

$Hg : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^2 4f^{14} 5d^{10}$

نستطيع كتابة التشكيل الالكتروني لمختلف العناصر انطلاقاً من معرفة ترتيب ازدياد الطاقة للطبقات والذي يأخذ الشكل التالي :

1s, 2s, 3s, 3p, [4s, 3d], 4p, [5s, 4d], 5p, [6s, 4f, 5d], 6p, [7s, 5f, 6d]

وضع بين الأقواس الطبقات ذات الطاقة المتماثلة والتي لاتملأ دوماً بالترتيب نفسه ، ويعود سبب تماثل الطاقة الى أن الزيادة التي يسببها العدد n تساوي النقصان الذي يسببه صغر العدد l ، فالحالة $4s$ مثلا وهي أعلى طاقة من الحالة $3d$ في ذرة الهيدروجين تنخفض بسبب الاقتراب من النواة الناتج من انخفاض الاندفاع الزاوي • تملأ الطبقة S أولاً ضمن هذه الاقواس ومن الممكن أن تخسر أحد الكتروناتها أو كليهما وتملأ الطبقات الأخرى ضمن القوس •

٣ ــ نموذج توماس ــ فيرمي الاحصائي :

لندرس الآن أول المسائل المرتبطة بتقريب الحقل المركزي • نستخدم عادة طريقتين لتحديد الطاقة الكامنة $V(r)$ أوجد الطريقة الاولى كل من العالم توماس والعالم فيرمي أما الثانية فاقترحها العالم هارتري •

يفترض في نموذج توماس ــ فيرمي الاحصائي أن $V(r)$ يتغير ببطء كاف ضمن مسافة تساوي طول موجة الالكترون ، وبذلك يمكن انيتوضع العديد من الالكترونات ضمن حجم يكون فيه تغير الطاقة الكامنة صغيراً نسبياً • عندها نستطيع استخدام الميكانيك الاحصائي في معالجة الالكترونات التيتخضع

إلى احصاء فيرمي ـ ديراك ، أي توصف بتوابع موجية ذات تناظر مضاد • ففي درجة الحرارة النظامية تكون الطاقة الحرارية KT صغيرة بالمقارنة مع V (r) في كل مكان باستثناء حدود الذرة حيث يكون احتمال وجود الالكترون صغيراً • وفي هذه الحالة تتطلب احصائيات فيرمي ديراك ملء الحالات الالكترونية وفق ازدياد الطاقة اضافة الى افتراض جديد هو ثبات V (r) على المناطق التي يمكن أن يتوضع فيها عدد كبير من الالكترونات •

إن عدد الحالات الالكترونية ضمن مكعب طول حرفه L تتحقق على جدرانه الشروط الحدية الدورية هو $(\frac{L}{2\pi})^3 dk_x dk_y dk_z$ • يجب ضرب هذا العدد بـ 2 لكي نأخذ بعين الاعتبار حالات السبن الممكنة ، ويكون عدد الحالات التي يكون فيها الاندفاع $p = \hbar k$ مساوياً p_0 أو أصغر منه هو :

$$2\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \int_0^{p_0/\hbar} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} k^2\, dk \sin\theta\, d\theta\, d\varphi = \frac{P_0^3 L^3}{3\pi^2 \hbar^3} \qquad (1)$$

فإذا شغلت جميع هذه الحالات يكون عدد الالكترونات في واحدة الحجم والتي لاتزيد طاقتها الحركية على $\frac{p_0^2}{2m}$ هو $\frac{p_0}{4\pi^2 \hbar^3}$ • وتكون الطاقة الحركية العظمى عند أي مسافة r من النواة مساوية $-V(r)$ وإلا غادرت الالكترونات ذراتها • نتوصل استناداً الى ماسبق ، الى علاقة بين الكثافة الحجمية للالكترونات n (r) والطاقة الكامنة

$$n(r) = \frac{[-2mV(r)]^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} \qquad (2)$$

ويتعين الكمون الكهربائي الساكن $-\frac{V(r)}{e}$ بمعادلة بواسون بدلالة كثافة الشحنات $-n(r)\,e$

$$-\frac{1}{e}\nabla^2 V = -\frac{1}{er^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dV}{dr}\right) = 4\pi e\, n(r) \qquad (3)$$

تشكل المعادلتان السابقتان مجموعة آنية لكل من n و V ويمكن التعبير عن الشروط الحدية التي يجب تطبيقها على الحلول بدلالة الطاقة الكامنة V لذرة طبيعية عددها الذري Z • فعندما تتناهى r نحو الصفر يكون الحد المسيطر في الطاقة الكامنة هو أثر النواة فقط أي $V(r) \rightarrow \frac{-Zr^2}{r}$ • وعندها تتناهى r اللانهاية يجب ألا يكون بداخل الكرة التي نصف قطرها r شحنة كهربائية صافية (لأن الذرة معتدلة كهربائياً) • لذلك تتناقص V بسرعة أكبر من $\frac{1}{r}$ وينتهي المقدار $rV(r)$ الى الصفر • وهذا الشرط الحدي يختلف عن سابقـه حيث يأخذ الكمون الشكل $-\frac{e^2}{r}$. ان الفرق بين الكمون الحقيقي الذي تخضع له الالكترونات وكمون توماس ــ فيرمي أن الأخير هو الكمون الذي تخضع له شحنة اختياريـة صغيرة وبالتالي يعبر عن الطبيعة الاحصائية للتقريب في طريقـة فيرمي ــ توماس ويكون الحل ، باستخدام كمون توماس ــ فيرمي ، دقيقاً عنـدما تصبح الكتلـة m كبيرة جداً والشحنة e صغيرة جداً وبالتالي يصبح المقدار $m^3 e^4$ ثابتـاً ويصبح طول موجة الالكترون معدوماً وكثافة الجسيمات لانهائية • وفي هذه الحالة يكون الكمون ثابتاً ويتواجد عدد كاف من الالكترونات يجوز معها تطبيق الميكانيك الاحصائي •

٤ ــ حساب الكمون :

نجد بحذف $n(r)$ من المعادلتين السابقتين :

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left[r^2\frac{d(-V)}{dr}\right] = \frac{4e^2\,[-2mV(r)]^{3/2}}{3\pi\hbar^3} \qquad (4)$$

باستخدام هذه المعادلة ، وكذلك باستخدام الشروط الحدية المذكورة أعلاه ، وباستخدام المتحولات عديمة الابعاد التابعة لكل من $Z , E , m , \hbar$ نجد :

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} X \qquad r = bx$$

$$b = \frac{1}{2}\left(\frac{3\pi}{4}\right)^{2/3} \frac{\hbar}{me^2 Z^{1/3}} = \frac{0.885}{Z^{1/3}} a_0 \qquad (5)$$

حيث $a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$ ، بالتعويض في معادلة $V(r)$ نجد :

$$x^{1/2} \frac{d_2 X}{dx^2} = X^{3/2} \qquad (6)$$

وتخضع للشرطين $x \to 0 \to X = 1 \quad , \quad x \to \infty \to X = 0$.

حسب الحل الدقيق للمعادلة الأخيرة من قبل العالمين بوش وكالدولووضعفي جداول .

وتشير معاملات المعادلة أعلاه الى تناسب نصف قطر الـذرة عكساً مع الجذر التكعيبي للعدد الذري ، كما تظهر أن تقريب توماس ـ فيرمي يتحسن بازديادالعدد الذري ، فالكمون عند مسافة تساوي نصف قطر الذرة متناسب مع $Z^{4/3}$ ، وطول موجة الالكترون متناسب مع $Z^{-2/3}$.

أما حلول المعادلة فهي :

$$(7) \qquad \text{من أجل قيم صغيرة لـ } x \qquad X(x) = 1 - 1.588\,x + \frac{4}{3} x^{3/2} + \dots$$

$$\text{من أجل قيم كبيرة لـ } x \qquad X(x) = \left[1 + \left(\frac{x}{144}\right)^{\lambda/3}\right]^{3/\lambda} \;;\; \lambda = 0.772$$

٥ ـ حقول هارتري غير المتناقضة :

افتراض العالم هارتري أن كل الكترون يتحرك في حقل مركزي يمكن حسابه من كمون النواة ومن التوابع الموجية للالكترونات الاخرى منطلقاً من أن كثافة الشحنة المرتبطة بالالكترون تساوي $-e$ مضروباً بكثافة الاحتمال الموضعي ويتم ذلك بحل معادلة شرودينغر من أجل كل الكترون في حقله المركزي ثم جعل التوابع الموجية الناتجة غير متناقضة مع الحقول التي حسبت منها ، أي يوصف الالكترون k بالتابع الموجي المنظم $u_k(r_k)$ المحقق للمعادلة :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_k^2-\frac{Ze^2}{r_k}+\sum_{j\neq k}\int|u_j(\mathbf{r}_j)|^2\frac{e^2}{r_{jk}}d^3r_j\right]u_k(\mathbf{r}_k)=\epsilon_k u_k(\mathbf{r}_k) \qquad (8)$$

حيث $|\mathbf{r}_{jk}|=|\mathbf{r}_j-\mathbf{r}_k|$ فإذا وجد Z الكتروناً في الذرة ، عندها تتألف هذه المعادلة من مجموعة مؤلفة من Z معادلة آنية غير خطية تكاملية تفاضلية لـ Z من التوابع الموجية $u_k(r_k)$ ولقد استخدم هارترى طريقة التقريب المتتالي لحلها • ففي حالة ذرة بالكترونين فقط (مثلاً) لدينا :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2-\frac{Ze^2}{r_1}+\int|u_2(r_2)|^2\frac{e^2}{r_2-r_1}d_3r_2\right]u_1(r_1)=\varepsilon_1 u_1(r_1)$$

$$(9)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2-\frac{Ze^2}{r_2}+\int|u_1(r_1)|^2\frac{e^2}{r_1-r_2}d_3r_1\right]u_2(r)=\varepsilon_2 u_2(r_2)$$

نستبدل بالحدين الثاني والثالث في كل معادلة كمونين افتراضيين ونحسب التوابع الموجية للالكترونات ثم نستخدم هذه التوابع الموجيـة من أجـل التوصل إلى كمون جديد وهكذا نكرر العملية حتى تتوصل الى الدقة المطلوبة • والتقريب الاساسي المطبق هو أخذ متوسط الطاقة الكامنة في الحد الثالث على الزوايا لجعل

تابع الكمون متناظراً كروياً • وعندها نستطيع كتابة الحل على شكل جـداء لتابع الموضع بتابع الزوايا • كما نطبق تبسيطاً آخر هو جعل $2(2l+1)$ الكتروناً أو أقل تتحرك ضمن الكمون نفسه ويكون لها التابع الموجي نفسه ، ومن الواضح أن تقريب هارتري يهمل العلاقة بين مواضع الالكترونات بافتراض أن التابع الموجي هو جداء التوابع الموجية للالكترونات المختلفـة ، وكذلك لم يؤكـد على التناظر المضاد للتوابع ، وكل ماطبق هو مبدأ باولي في الاستبعاد •

٦ ـ تصحيح تقريب الحقل المركزي :

سندرس الآن المشكلة الثانية في تقريب الحقـل المركزي ألا وهي تصحيح النتائج المترتبة على استخدام الحقل المركزي • لقد تم حذف حدين في هذا التقريب الأول هو الفرق بين التفاعل الكهربائي الساكن الفعلي بين الالكترونات والمتوسط الذي استخدم في الحقل المركزي • والثاني هو طاقة التفاعل بين الاندفاع المداري والسبن ويأخذ الصيغة

$$\sum_k \xi(r_k) \mathbf{L}_k \cdot \mathbf{S}_k \qquad (10)$$

حيث L_k هو الاندفاع الزاوي المداري (ويساوي $r_k \times p_k$) للالكترون k ، وتعطى القيمة الذاتية لكل من L_k^2 و L_{kz} بدلالة الاعداد الكمومية l, m_l وفق العلاقتين $l(l+1)$ و $m_l \hbar$ على الترتيب• s_k هوالسبن $\frac{1}{2}\hbar\sigma_k$ للالكترون k ، أما التابع $\xi(r)$ فيأخذ الصيغة

$$\xi(r) = \frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \qquad (11)$$

وذلك بدلالة كمون الحقل المركزي $V(r)$ •

ففي العناصر القلوية مثلاً يوجد الكترون واحد (الكترون تكافؤ) تحت تأثير النواة وباقي الالكترونات الاخرى في الذرة • ونحتاج الى عددين كمومين فقط ، في حالة غياب الحقل الخارجي ، هما l و n • ويأخذ مؤثر هاميلتون الصيغة •

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r) + \xi(r)\, L\cdot S \qquad (12)$$

إن الاندفاع الزاوي الكلي $J = L + S$ هو أحد ثوابت الحركة وبالتالي فإن

$$J^2 = j(j+1)\hbar^2 \quad \text{و} \quad J_z = m\hbar \qquad (13)$$

تملك الحالات التي لها قيم مختلفة من قيم j طاقات مختلفة مع بقاء الانطباق $(2j+1)$ والذي يمكن ازالته بتطبيق حقل خارجي • ان اختلاف طاقة حالات j يرجع للحد $L\cdot S$ ويحسب كما يلي :

$$J^2 = (L+S)^2 = L^2 + S^2 + 2L\cdot S$$

$$\langle lj|L\cdot S|lj\rangle = \frac{1}{2}[j(j+1) - l(l+1) - 3/4]\,\hbar^2$$

فإذا كان لـ l قيمة غير معدومة فإن التصحيح الناتج من $\xi(r)\, L\cdot S$ هو :

$$\frac{1}{2} l\, \eta_{nl} \quad \text{من أجل} \quad j = l + \frac{1}{2}$$

$$(15)$$

$$\text{و} \quad -\frac{1}{2}(l+1)\,\eta_{nl} \quad \text{من أجل} \quad j = l - \frac{1}{2}$$

حيث

$$\eta_{nl} = \hbar^2 \int_0^\infty |R_{nl}(r)|^2\, \xi(r)\, r^2\, dr \qquad (16)$$

فإذا أخذنا التابع $V(r)$ من الشكل $V(r) = -\frac{Ze^2}{r}$ واستخدمنا خواص تابع لاغيير $R_{nl}(r)$ نجد :

$$\eta_{nl} = \frac{\hbar^2 Ze^2}{2m^2C^2}\int_0^\infty \frac{1}{r} R^2_{nl}(r)\,dr =$$

$$= \frac{e^2\hbar^2 Z^4}{2m^2 C^2 a_0^3 n^3 l\left(l + \frac{1}{2}\right)(l+1)} \qquad (17)$$

وهذا مايفسر وجود التضاعف في خطوط الطيف فالطاقة المقابلة للعزم الزاوي الكلي $J = l + \frac{1}{2}$ مختلفة عن الطاقة المقابلة للعزم الزاوي الكلي $J = l - 1/2$.

ينطبق هذا الامر على جميع العناصر القلوية .

تمرين :

قدر بصورة تقريبية كلا من المقادير التالية مستخدماً نموذج توماس ــ فيرمي

آ ــ متوسط المسافة بين الالكترونات والنواة .

ب ــ متوسط الطاقة الحركية للالكترون .

حـ ــ الطاقة اللازمة لتأيين الذرة .

د ــ متوسط العزم الزاوي للالكترون .



الفصل التاسع

النظرية الكمومية للجزيئات

النظرية الكمومية للجزيئات

١ ـ نظرية التقريب الكظوم Adiabatic Approximation :

عند دراسة الخواص الكمومية للجزيئات وللأجسام الصلبة ، يجب علينـــا أن نأخذالالكترونات ونوى الذرات بعين الاعتبار وتكون النوى أثقل من الالكترونات فنواة الرصاص مثلاً أثقل من الالكترون بـ 380 ألف مرة ونواة الصوديوم أثقـــل بـ 42 ألف مرة تقريباً من الالكترون • لذلك تكون حركة النواة أبطأ بكثير من حركة الالكترون ،ويمكننا تنفيذ دراسة تقريبية لخواص الجزيئات والاجسام الصلبة مفترضين ثبات النوى في التقريب الصفري وادخال حركاتها في التقريبات الأعلى مستخدمين نظرية الاضطراب ويدعى هذا الأسلوب بالتقريب الكظوم • ولتوضيح الأفكار الأساسية التي تستند اليها هذه الطريقة سندرس جملـــة تحـــوي بعض الالكترونات لكل منها كتلة قدرها μ وبعض نوى الذرات لكل منها كتلة قدرها M •ولنرمز بـ r لمجموعة جميع احداثيات الالكترون مقاسة في جملة الاحداثيات المرتبطة بمركز كتلة الجملة وبالرمز R لمجموعة احداثيات النـــواة • نستطيع كتابة مؤثر هاميلتون الذي يعين الحالات الداخلية للجملة كما يلي :

$$\hat{H} = \hat{T}_R + \hat{T}_r + \hat{V}(r, R) \qquad (1)$$

حيث $\hat{T}_r = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\sum_i \frac{\partial^2}{\partial r_i^2}$ هو مؤثر الطاقة الحركية للالكترونات

و $\hat{T}_R = -\frac{\hbar^2}{2M}\sum_j \frac{\partial^2}{\partial R_i^2}$ هو مؤثر الطاقة الحركية للنوى

و $\hat{V}(r, R)$ هو مؤثر الطاقة الكامنة للتفاعل بين جميع الجسيمات •

تستند طريقة التقريب الكظوم على افتراض صغر مؤثـر الطاقـة الحركية للجسيمات الثقيلة ($\hat{T}_R$) لذلك يعامل كمؤثر اضطراب ، وهنا تتذكر أننا كنا نعد مؤثرالاضطرابجزءاً من مؤثر الطاقة الكامنة لذلك نعيد كتابة المعادلة (1) فتصبح

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{T}_R \; ; \quad \hat{H}_0 = \hat{T}_r + \hat{V}(r, R) \qquad (2)$$

ففي التقريب الصغري ترد مسألة الحالات المستقرة للجسلة الى حل معادلـة شرودينغر

$$[\hat{H}_0 - \varepsilon_n(R)]\, \varphi_n(R, r) = 0 \qquad (3)$$

وذلك من أجل قيمة ثابتة لاحداثيات الجسم الثقيل R • ويحدد الدليـل n جميع الأعداد الكمومية المميزة للحالات المستقرة • وتكون طاقات هذه الحالات (ε_n) تابعة لاحداثيات الجسم الثقيل R • وكذلك تكون التوابع الموجيـة لهذه الحالات تابعة أيضاً للاحداثيات R • أي أن التـوابع الموجية $\varphi_n(R, r)$ تصف حالات الحركة للجسيمات الخفيفة من أجل قيم محددة لاحداثيات الجسم الثقيل R أو من أجل تغيرات بطيئة جداً (كظومة) للاحداثيات R •

لنفترض أننا نعرف حلول المعادلة (3) عندها نستطيع البحث عن الحالات المستقرة للجملة ذات المؤثر (1) أي البحث عن حل للمعادلة :

$$(\hat{H} - E)\, \Psi(R, r) = 0 \qquad (4)$$

الذي يأخذ الشكل :

$$\Psi(R, r) = \sum_n \Phi_n(R)\, \varphi_n(R, r), \qquad (5)$$

حيث $\varphi_n(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ هي التوابع الذاتية للمؤثر $\hat{H}_0$ في التقريب الكظوم •

وبما أن المؤثر $\hat{H}_0$ يأخذ قيماً ذاتية منفصلة وأخرى مستمرة (طيف منفصل ومستمر) يجب أن نفهم المجموع في العلاقــة (5) بالمعنى المعمم فهو مجموع على الحالات المنفصلة وتكامل على الحالات المستمرة • نحصل بتعويض العلاقة (5) في المعادلة (4) وبالضرب بـ $\varphi^*(\mathbf{R,r})$ ثم بالمكاملة على احداثيات الجسيمــات الخفيفة ، على مجموعة المعادلات

$$(\hat{T}_R + \varepsilon_m(R) - E)\Phi_m(R) = \sum_n \hat{\Lambda}_{mn}\Phi_n(R), \qquad (6)$$

حيث يعطى المؤثر $\hat{\Lambda}_{mn}$ بالعلاقة

$$\hat{\Lambda}_{mn} = \frac{\hbar^2}{M}\sum_j \int \varphi_m^*(R, r)\frac{\partial}{\partial R_j}\varphi_n(R, r)\, dr\, \frac{\partial}{\partial R_j} - \int \varphi_m^*(R, r)\, \hat{T}_R\varphi_n(R, r)\, dr \qquad (7)$$

لحل مجموعة المعادلات (6) نستطيع عد المــؤثر (7) صغــيراً ونعالج المجموعة (6) بطريقــة التقريب المتتالي • ففي التقريب الصفري نستبدل الصفر بالطرف الأيمن في المعادلة (6) ، فتنفصل المعادلات (6) الى مجمــوعة مــن المعادلات المستقلة هي

$$[\hat{T}_R + \varepsilon_m(R)]\, \Phi^0_{m\nu}(R) = E^0_{m\nu}\, \Phi^0_{m\nu} \qquad (8)$$

تمثل كل منها حالة حركة من حركات الجسيمات الخفيفة ، محددة بالعــدد الكمومي m •

تشير المعادلة (8) الى أن حركة الجسيمات الثقيلة تتميز بالطاقة الكامنة $\varepsilon_m(R)$ المقابلة لطاقات الجسيمات الخفيفة في المعادلة (3) من أجــل أوضاع محددة للجسيمات الثقيلة •

يُرَدّ التابع الموجي (5) للجملة ، في التقريب الصفـري الى الجـداء البسيط

$$\Psi_{m\nu} = \Phi^{0}_{m\nu}(R)\, \varphi_{m}(R, r) \qquad (9)$$

أي أن لكل حالة حركة من حركات الجسيمات الخفيفة المعينـة بالاعـداد الكمومية m ، حالات حركة للجسيمات الثقيلة تختلف عن بعضها بعضـا بالعدد الكمومي ν .

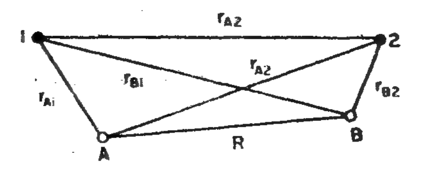
يصح استخدام التقريب الكظوم عندما يكون حل المعادلة (6) الدقيـق قريباً جداً من حل معادلة التقريب الصفري (8) ، ونستطيع باستخدام نظريـة الاضطراب البرهان على أن شرط تطبيق التقريب الكظـوم هو تحقق المتراجحـة التاليـة :

$$\langle \Phi^{0}_{m\nu} | \hat{\Lambda}_{nm} | \Phi^{0}_{n\nu'} \rangle \ll | E^{0}_{m\nu} - E^{0}_{n\nu'} | \qquad (10)$$

وذلك من أجل $m \neq n$ وفي حالة قيم اختيارية لكل من ν و ν' .

٢ ـ جزيء الهيدرجين :

سندرس الآن المعادلة (3) المحـددة لطاقـة الالكترونـات في جزيء الهيدرجين مفترضين ثبات قيم احداثيات النواة ، أي بتطبيق التقريب الكظـوم . يتكون جزيء الهيدرجين من نواتين A و B تفصلهما مسافة R ،والكترونين 1 و 2 كما في الشكل :



بكتب مؤثر هاميلتون لهذا الجزيء بالشكل

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2\mu}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - e^2\left(\frac{1}{r_{A_1}} + \frac{1}{r_{A_2}} + \frac{1}{r_{B_1}} + \frac{1}{r_{B_2}} - \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{R}\right) \quad (11)$$

سنفترض أن الذرتين بعيدتان عن بعضهما بعضاً بعداً كافياً عندها تصبح مسألة حل المعادلة :

$$[\hat{H}_0 - \varepsilon(R)]\,\varphi(R, 1, 2) = 0 \quad (12)$$

هي البحث عن الحالات المستقرة لجملة تكون فيها مواضع النوى ثابتة ، وتحل باستخدام نظرية الاضطراب . طبقت هذه الطريقة على جزيء الهيدروجين من قبل لندن وهيتلر عام ١٩٢٧ .

يُبنى التابع الموجي للجزيئة في التقريب الصفري من التوابع الموجية للذرات المعزولة ، وتتعين طاقة الجملة بالقيمة المتوسطة للمؤثر $\hat{H}_0$ في الحالة المقابلة للتقريب الصفري في التوابع الموجية . أي أن التابع الموجي للجزيء في حالته الأساسية ، يُبنى من التوابع الموجية للحالة الاساسية 1S لذرات الهيدرجين . وعند اختيار التوابع الموجية في التقريب الصفري يجب الانتباه الى تناظر التوابع الموجية لان الالكترونين متشابهان . توجد حالتان ممكنتان لحالات السبن ،المفردة Singlet ، والثلاثية Triplet ، وتقابلان نوعين من توابع الاحداثيات :

$$\varphi_s = [2(1+s^2)]^{-1/2}\{\Psi_A(1)\Psi_B(2) + \Psi_A(2)\Psi_B(1)\} \quad (13)$$

$$\varphi_t = [2(1-s^2)]^{-1/2}\{\Psi_A(1)\Psi_B(2) - \Psi_A(2)\Psi_B(1)\} \quad (14)$$

حيث :

$$\Psi_A(1) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r_{A1}}{a}} \quad ; \quad \Psi_A(2) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r_{A2}}{a}}$$

$$\Psi_B(1) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r_{B1}}{a}} \quad ; \quad \Psi_B(2) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r_{B2}}{a}} \qquad (15)$$

$$a = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$$

$$S = \int \Psi_A(1)\,\Psi_B(1)\,d\tau = \frac{1}{\pi a^3} \int e^{-(r_{A1}+r_{B1})/a} \cdot d\tau \qquad (17)$$

يدعى S بتراكم التكامل للتابع الموجي ، ونستطيع بسهولة انجاز هـذا التكامل مستخدمين الاحداثيات القطعية

$$\mu = \frac{r_{A1} + r_{B1}}{R} \quad ; \quad \nu = \frac{r_{A1} - r_{B1}}{R} \quad ; \quad \varphi \qquad (17)$$

حيث φ هي الزاويــة مع المحور الواصل بين النواتين ، إن عنصـر الحجـم في جمـلة الاحداثيــات القطعيــة هــو : $d\tau = \frac{1}{8} R^3 (\mu^2 - \nu^2)\, d\mu\, d\nu\, d\varphi$

وحدود التكامل هي

$$1 \leqslant \mu \leqslant \infty \quad ; \quad -1 \leqslant \nu \leqslant 1 \quad ; \quad 0 \leqslant \varphi \leqslant 2\pi$$

باستخدام هذه الاحداثيات يصبح التكامل (16) من الشكل :

$$S = \frac{\rho^3}{8\pi}\int_1^{\infty} e^{-\rho\mu}\, d\mu \int_{-1}^{+1} (\mu^2 - \nu^2)\, d\nu \int_0^{2\pi} d\varphi = \left(1 + \rho + \frac{1}{3}\rho^2\right) e^{-\rho} \quad (18)$$

حيث $\rho = \frac{R}{a}$ ولقد تم استخدام العلاقة :

$$\int_1^{\infty} \mu^n e^{-\varrho\mu}\, d\mu = \frac{n!\, e^{-\varrho}}{\varrho^{n+1}} \sum_{k=0}^{n} \frac{\varrho^k}{k!} = D_n(\varrho). \quad (19)$$

ولحساب طاقة الجملة في الحالة المفردة وفي الحالة الثلاثية من حالات السبن في التقريب الاول لنظرية الاضطراب يجب أن نحسب قيم التكاملين

$$\varepsilon_s = \int \varphi_s^* \hat{H}_0 \varphi_s\, d\tau \quad و \quad \varepsilon_t = \int \varphi_t^* \hat{H}_0 \varphi_t\, d\tau$$

بتعويض الصيغ (11) و (13) و (14) فيهذين التكاملين متذكرين أنالتوابع الموجية (11) هي التوابع الذاتية لمؤثرات الذرات المعزولة المقابلة للطاقة E_{1s} أي :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_1^2 - \frac{e^2}{r_{A_1}}\right)\Psi_A(1) = E_{1s}\Psi_A(1)$$

نجـد :

$$\Delta\varepsilon_s = \varepsilon_s - 2E_{1s} = \frac{Q + A}{1 + s^2}$$

$$(20)$$

$$\Delta\varepsilon_t = \varepsilon_t - 2E_{1s} = \frac{Q - A}{1 - s^2}$$

حيث :

$$Q = \int \Psi_A^2(1)\, \Psi_B^2(2) \left[\frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_{B1}} - \frac{e^2}{r_{A2}} \right] d\tau + \frac{e^2}{R} \qquad (21)$$

$$= - \int \Psi_A^2(1) \frac{e^2}{r_{B1}} d\tau_1 - \int \Psi_B^2(2) \frac{e^2}{r_{A2}} d\tau_2 +$$

$$\int \Psi_A^2(1) \frac{e^2}{r_{12}} \Psi_B^2(2)\, d\tau + \frac{e^2}{R}$$

يعين الحد الاول من هذه الصيغة القيمة المتوسطة للتفاعل الكولوني بين النواة B والالكترون 1 وتقابل كثافة الكترونية $\rho_A(1) = -\Psi_A^2(1)$ وذلك عند إهمال الترابط الذي يسببه تناظر التوابع الموجية (13) و(14) وبالمثل يحدد التكامل الثاني التفاعل بين الالكترون 2 والنواة A • ويكون هذان التكاملان متساويين عددياً • يحدد التكامل الثالث التفاعل بين الالكترونين، أما الحد الأخير فيمثل التدافع بين النواتين • يدعى التكامل Q بتكامل كولون •

تتحدد طاقة التفاعل بالتكامل :

$$A = \int \Psi_A(1)\, \Psi_B(2) \left[\frac{e^2}{R} + \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_{B1}} - \frac{e^2}{r_{A2}} \right] \Psi_A(2)\, \Psi_B(1)\, d\tau$$

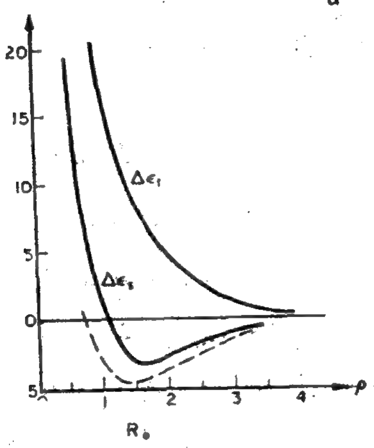
$$= \frac{e^2 s^2}{R} + \int \Psi_A(1)\, \Psi_B(2) \frac{e^2}{r_{12}} \Psi_A(2)\, \Psi_B(1)\, d\tau -$$

$$- s \int \Psi_A(1) \frac{e^2}{r_{B1}} \Psi_B(1)\, d\tau - s \int \Psi_B(2) \frac{e^2}{r_{A2}} \Psi_A(2)\, d\tau_2$$

(22)

ويدعى عادة بتكامل التبادل لأنه يقابل الجزء ، من التفاعل الكولوني بين الالكترونات والنوى ، المرتبط بالعلاقة بين الكترونات في أثناء حركتها ، وينشأ عن التناظر المضاد للتوابع الموجية وفقاً لمبدأ باولي .

يكون التكاملان A و Q تابعين للمسافة بين النواتين ونجد في الشكل أدناه الطاقات $\Delta\varepsilon_s$ و $\Delta\varepsilon_t$ مقدرة بالالكترون فولط كتابع للمسافة بين النواتين مقدرة بالوحدة الذرية $\rho = \frac{R}{a}$.



يبين هذا الشكل أنه عندما تقترب ذرتا الهيدروجين من بعضهما بعضاً في حالة السبن المفردة (تعاكس في السبن) تنخفض الطاقة لتبلغ نهايتها الصغرى عند $R_0 = 1.51\ a$ ، ترتفع بعدها الطاقة بشكل حاد مع اقتراب الذرتين نحو بعضهما بعضاً . أما عندما تقترب الذرتان من بعضهما بعضاً في حالة السبن الثلاثية (اتفاق في جهة السبن) تتزايد الطاقة $\Delta\varepsilon_t$ وهذا يعني تدافعاً بين الذرتين .

أي أن ذرتي الهيدروجين تشكل جزيئاً عندما تقتربان من بعضهما بعضاً في الحالة المفردة للسبن فقط ، ويجب أن تقابل مسافة التوازن R_0 بين النواتين في الجزيئات المستقرة ، أصغر قيمة للطاقة $\Delta\varepsilon_s$ ، استطاع لندن وهيتلر باستخدام نظرية الاضطراب التوصل الى القيمة $R_0 = 1.51\ a \simeq 8\ nm$ أما القيمة التجريبية فهي $R_0 = 7.395\ nm$.

أي أن التوافق بين القيمتين رديء وهذا يعود الى مجال استخدام نظرية الاضطراب فهي جيــدة من أجل $R > R_0$ • ولكن الوصف الكيفي لسلوك التفاعل بين ذرات الهيدروجين في الحالة المفردة والحالة الثلاثية للسبن صحيح • أعطى استخدام طريقة التغيرات توافق أفضل بكثير مع القيم التجريبيــة ، فتوصل وانــغ الــى القيمــة $R_0 = 7.6$ nm •

تمرين : استخدم الاحداثيات القطعية واحسب كل من Q و A • •

الجواب:

$$Q = \frac{e^2}{a\rho} e^{-2\rho} \left[1 + \frac{5}{8}\rho - \frac{3}{4}\rho^2 - \frac{1}{b}\rho^3\right]$$

$$A = \frac{e^2}{a} \left\{ \frac{s^2}{\rho} \left(1 + \frac{6}{5}(c + \ln\rho)\right) + \right.$$

$$+ e^{-2\rho} \left(\frac{11}{8} + \frac{103}{20}\rho + \frac{94}{15}\rho^2 + \frac{11}{15}\rho^3 \right)$$

$$\left. + \frac{6M}{5\rho} \left(M Ei(-4\rho) - 2 s\, Ei(-2\rho) \right) \right\}$$

حيث $c = 0.57722$ هو ثابت أولر

$$M = e^2 \left(1 - \rho - \frac{\rho^2}{3}\right) \quad \text{و} \quad Ei(x) = -\int_{-x}^{\infty} \left(e^{-\xi} / \xi\right) d\xi \quad \text{و}$$

٣ ـ كمون مورس :

لندرس الآن الجزيئات ثنائية الذرة ولننظر الى طبيعة حلول المعادلة :

$$\left[- \sum_{j}^{N} \frac{\hbar^2}{2M_j} \nabla_j^2 + U(\mathbf{R}_j) \right] w(\mathbf{R}_j) = E\, w(\mathbf{R}_j) \qquad (23)$$

الممثلة لحركات النوى • فاذا كـان للنواتين الكتلتان M_1 و M_2 وكـان للشعـاع الواصل بينهما (R) الاحداثيات القطبية R, θ, φ تصبح معادلة الحركة النسبية لهما من الشكل :

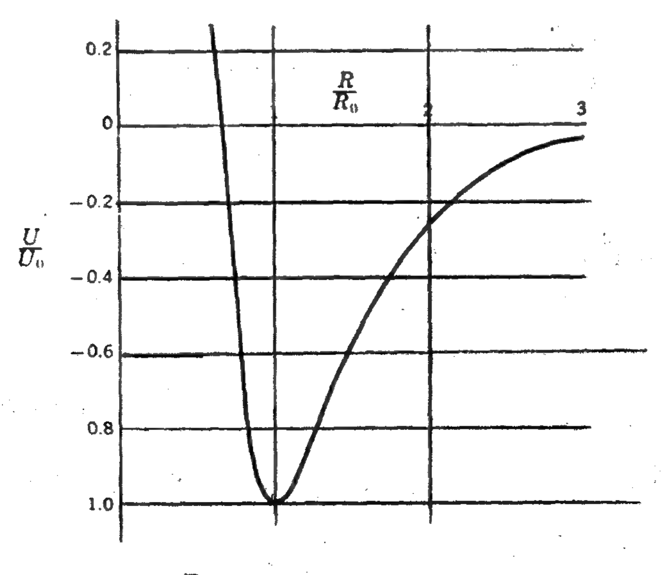
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 + U(R) \right] w(R,\theta,\varphi) = E\, w(R,\theta,\varphi) \qquad (42)$$

حيث $M = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2}$ هي الكتلة المختزلة •

وكما وجدنا في حالة جزيء الهيدروجين ، يأخذ تابع الطاقة الكامنة ، لأخفض الخالات الالكترونية للجزيئات الحقيقية ثنائية الذرة ، شكلاً رياضياً بسيطاً يمكـن تمثيله بدقة جيدة بواسطة تابع تحليلي يتضمن ثلاثة وسطاء تتعين قيمهـا بالمقارنـة مع القيمة التجريبية ، ويأخذ الصيغة :

$$U(R) = U_0 \left(e^{-2(R - R_0)/a} - 2\, e^{-(R - R_0)/a} \right) \qquad (25)$$

يدعى هذا التابع بتابع مورس أو بكمون مورس وله الشكل المبين أدناه •



كمون مورس ورسم من أجل $a = \frac{R_0}{2}$

يتناهى التابع U الى الصفر عند المسافات الكبيرة ويأخذ قيمتـه الصغرى $-U_0$ عند $R = R_0$ ويصبح كبيراً وموجباً عندما تقترب R من الصفر وذلـك في حالة كون عرض مجال الجذب (a) أصغر مـن مسافـة الاستقرار R_0. يظهر شكل التابع U المظهر العام المتوقع بالنسبة للجزيئات ثنائية الذرة • ولقـد تم اختيار القيمـة صفر للطاقـة الكامنة عندما تكون الذرتان بعيدتين عن بعضهما بعضاً • يأخذ التابع U قيماً سالبة مع تناقص R بسبب قـوة فـان درفالس الجاذبة ، أما عندما تتناقص R أكثر من حـد معين تحـل قـوة جذب أكبر من قـوة فان درفالس وتدعى بجذب هيتلر ــ لندن التجاوبي ، ومـع استمرار تناقص R تبدأ قـوة التدافع بـين النوى فيصبح التابع موجباً وكبيراً •

٤ ــ دوران الجزيئات ثنائية الذرة واهتزازها :

يمكن فصل المتحولات في المعادلة (24) ونستطيع كتابة الحل بالشكل :

$$w(R, \theta, \varphi) = \frac{\chi(R)}{R} \cdot Y_{KM_k}(\theta, \varphi)$$

حيث K و M_k هما العددان الكواتنيان للعزم الزاوي في حالة جسيم وحيد ضمن حقل مركزي (l و m) ، وتأخذ معادلة الموضع الشكل :

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial_2 \chi}{\partial R^2} + W(R)\chi = E\chi \qquad (26)$$

حيث

$$W(R) = U(R) + \frac{\hbar^2 K(K+1)}{2MR^2} \quad \text{و} \quad k = 0, 1, 2, \ldots$$

تمثل المعادلة (26) حركة جسيم كتلته M ضمن الكمون W (R) ، وتخضع

للشرط الحدي $\chi = 0$ ، $R \to 0$ • فاذا لم يكن العدد K كبيراً، يتشابه التابع $W(R)$ مع التابع $U(R)$ • وفي هـذه الحالة نهتم بصورة رئيسة بالاهتزازات ذات السعات الصغيرة حول النهاية الصغرى لذلك تنشر التابع W حول تلك النهاية R_1 والتي تأخذ القيمة R_0 من أجل $K = 0$ ، أي :

$$W(R) = W_0 + \frac{1}{2} K_0 (R - R_1)^2 +$$

$$b(R - R_1)^3 + c(R - R_1)^4 \ldots \qquad (27)$$

حيث أهملنا حدود المراتب العليـا • فاذا أهملنا الحدين c و b أيضاً ، ومـددنا المجال R الى $\infty -$ عندها يكون للمعادلة (26) قيم ذاتية مماثلة للقيم الذاتية لهزاز توافقي مع اضافة ثابت هو w_0 • وتشكل هذه القيم تقريباً جيداً من أجـل قيم معتدلة للعدد الكواتني الاهتزازي ν • ويمكن التوصل الى تقريب أفضـل بادخال الحدين b و c في المعادلة (27) كمؤثرات اضطراب على الهزاز •

٥ ـ سويات الطاقة :

إن القيم الذاتية للمعادلة (26) هي :

$$E = W_0 + \hbar \left(\frac{K_0}{M}\right)^{1/2} \left(\nu + \frac{1}{2}\right) -$$

$$- \frac{\hbar^2 b^2}{M K_0^2} \left[\frac{15}{4}\left(\nu + \frac{1}{2}\right)^2 + \frac{7}{16}\right]$$

$$+ \frac{3\hbar^2 c}{2 M K_0} \left[\left(\nu + \frac{1}{2}\right)^2 + \frac{1}{4}\right] \qquad (28)$$

حيث $\nu = 0, 1, 2, \ldots$ و W_0 ، K_0 ، b ، c يمكـن التعبير عنها

بدلالة سلاسل قوى من $\hbar(\hbar + 1)$ • ترتبط هذه الثوابت بوسطاء التابع $U(R)$ فاذا كان للتابع U الصيغة (25) نجد :

$$R_1 = R_0 + \frac{\hbar^2 K(K+1)a^2}{2MR_0^3 U_0} \quad ;$$

$$b = -\frac{U_0}{a^3} \quad ; \quad c = \frac{7U_0}{12\,a^4}$$

$$W_0 = -U_0 + \frac{\hbar^2 K(K+1)}{2MR_0^2} - \frac{\hbar^4 K^2 (K+1)^2 a^2}{4M^2 R_0^6 U_0}$$

$$K_0 = \frac{2U_0}{a^2} - \frac{3\hbar^2 K(K+1)}{MR_0^2 a^2} \; \frac{a}{R_0}\left(1 - \frac{a}{R_0}\right)$$

لقد أبقينا من النشور حدوداً كافيــة من أجل قيم صحيحة للطاقــة E مــن المرتبة الثانية في كل من $(\nu + \frac{1}{2})$ و $K(K+1)$.

تشير المعادلة الاولى من المجموعة (29) الى أن الجزيئة تمتط بسبب الدوران، وتعطي المعادلة الثانية طاقة الاستقرار U_0 – مع طاقة الدوران محسوبة للمرتبــة الثانية أما الحد الاول فهو طاقــة الدوران $\frac{\hbar^2 K(K+1)}{2I_0}$ ؛ حيــث $I_0 = MR_0^2$ هو عزم العطالة للجزيئة حــول محور معامد للمستقيم الواصل بين النواتين ، وهي طاقــة جسم صلب نفسها يدور حول المحور نفسه • أما المعادلة الثالثة فتعطي تغير المرونة بسبب الامتطاط •

يمكن نشر الحد الثاني في المعادلة (28) باستخدام صيغة K_0 المعطاة بالعلاقة (29) فنجــد :

$$\hbar^2 \left(\frac{2U_0}{Ma^2}\right)^{1/2} \left(v + \frac{1}{2}\right)\left[1 - \frac{3\hbar^2 K(K+1)}{4MR_0^2 \; U_0} \frac{a}{R_0}\left(1 - \frac{a}{R_0}\right)\right]$$

ويعطي الحد الاخير في العلاقة (28) الطاقة الاهتزازية مقدرة حتى المرتبة الثانية.

$$\left(-\frac{15}{16} + \frac{7}{16}\right)\frac{\hbar^2}{Ma^2}\left(v + \frac{1}{2}\right)^2 = -\frac{\hbar^2}{2Ma^2}\left(v + \frac{1}{2}\right)^2 \quad (30)$$

٦ ـ تأثير التماثل بين النواتين :

اذاكانت النواتان متماثلتين في جزيء ثنائي الذرة عندها يجب أن يكون التابع الموجي متناظراً بالنسبة لتبادل النواتين في الموضع والسبن اذا كان لهما سبين معدوم أو مساوٍ عدداً صحيحاً من $\hbar$ ، كما يجب أن يكون التابع الموجي ذا تناظر مضاد اذا كان لهما سبين مساو عدداً نصف فردي من $\hbar$. وتتحدد نوعيــة التابعالموجي النووي بالتابع $Y_{KM_k}(\theta, \varphi)$ فتكون زوجية اذا كان K زوجياً ، وفردية اذا كان K فردياً . إن تبديل موضعي النواتين يكافيء تغيير اشارة شــعاع موضعهمــا النسبي (R) وهكذا تحدد الزوجية التناظر الفراغي للتابع الموجي ، فمن أجــل نواتين لكل منهما سبين معدوم أو مساوٍ عدداً صحيحاً من $\hbar$ يكون تابع السبن متناظراً من أجل قيم زوجية لـ K وذا تناظر مضاد من أجل قيم K الفرديــة ، أما في حالة نواتين لكل منهما سبين سبين مساوٍ نصف عدد فردي من $\hbar$ فيكون التابع الموجي للسبن ذا تناظرٍ مضاد من أجل قيم زوجية لـ K ، ومتناظراً منأجل القيم الفردية لـ K . ففي حالة نواتين لكل منهما سبين قدره $I\hbar$ تنقسم حالات السبن الكليــة $(2I+1)^2$ الى $(I+1)(2I+1)$ حالة متناظرة و $I(2I+1)$ حالة ذات تناظر مضاد . فمن أجل الغازات حيث التوازن الاحصائي تكــون نسبة الجزيئات ذات العدد الزوجي من K الى الجزيئاتا ذات العدد الفردي من K

مساواية $\frac{I+1}{I}$ اذا كــان I صفراً أو عــدداً صحيحاً وتساوي $\frac{I}{I+1}$ اذا كان I مساوياً نصف عــدد فردي ، وهذا يؤدي الى شدة كثافــة متناوبــة في حزمة الطيف (الدورانية) للجزيئات أحادية الذرة وثنائيتها ، ونستطيع بهــذا الأسلوب تحديــد السبن والاحصائيات المطلوبة للنوى المدروسة •

مسائل

١ ــ أوجد مستخدماً الكمون $V(x) = V_0 (1 - e^{-\mu x})^2$ سويات الطاقــة الاهتزازية للجزيء •

٢ ــ أوجد سويات الطاقة الدورانية مستخدماً الكمون

$$V(\rho) = V_0 \left(\frac{1}{\rho^2} - \frac{2}{\rho} \right)$$

حيث $r = \frac{\rho}{a}$ هي المسافة بين نواتي الجزيء •

★ ★ ★

ملحق ـ آ ـ

يتضمن الجدول التالي جميع الجسيمات الاولية المشاهدة باستثناء جسيمات التجاوب ، كما يلخص بعض خواصها الهامة

التفكك الرئيس	الطاقة السكونية	متوسط العمر	اللبن	الشحنة الكهربائية	الغرابة	الجسيم المضاد	الجسيم	الاسم		
								العائلة الباريونية		
$p + e^- + \bar{\nu}_e$	939.6	920	$-\frac{1}{2}$	0	0	$\bar{n}$	n	نترون	نكليونات	
مستقر	938.3	∞	$\frac{1}{2}$	+ 1	0	$\bar{P}^-$	P^+	بروتون		
$\Lambda^0 + k^-$	1672.2	8.2×10^{-11}	$\frac{3}{2}$	- 1	− 3	$\bar{\Omega}^-$	Ω^-	اوميغا		هايبرونات
$\Xi + \pi$	1530	6×10^{-23}	$\frac{3}{2}$	- 1,0	− 2	$\bar{\Xi}^*$	Ξ^*	كساي		
$\Lambda^0 + \pi^-$	1321.3	1.6×10^{-10}	$\frac{1}{2}$	- 1	− 2	$\bar{\Xi}^-$	Ξ^-			
$\Lambda^0 + \bar{\pi}^0$	1314.9	2.9×10^{-10}	$\frac{1}{2}$	0	− 2	Ξ	Ξ^0			
$\Lambda_0 + \pi$	1385	2×10^{-23}	$\frac{3}{2}$	− 1,0,1	− 1	$\bar{\Xi}^0$	Σ^*	سيغما		
$n + \pi^-$	1197.3	1.5×10^{-10}	$\frac{1}{2}$	− 1	− 1	$\bar{\Sigma}^-$	Σ^-			
$\Lambda^0 + \gamma$	1192.5	5.8×10^{-20}	$\frac{1}{2}$	0	− 1	$\bar{\Sigma}^0$	Σ^0			
$p + \pi^0$	1189.4	0.8×10^{-10}	$\frac{1}{2}$	+ 1	− 1	$\bar{\Sigma}^+$	Σ^+			

	دلتا	Δ^*	$\overline{\Delta}^*$	0	− 1,0,1,2	$\frac{3}{2}$	6×10^{-24}	1232	$p+\pi$; $p+\pi$; $n+\pi$
	لامبدا	Λ^0	$\overline{\Lambda^0}$	− 1	0	$\frac{-1}{2}$	2.6×10^{-10}	115.6	$p+\pi^-$
العائلة الميزونية									
kaon	كاون	$k^{\mp}$	$k^{\pm}$	± 1	± 1	0	1.2×10^{-8}	439.7	$p+\nu_\mu$
		k^0	$\overline{k_0}$	+ 1	0	0	0.9×10^{-10}	497.7	$\pi^+ + \pi^-$
pion	بيون	$\pi^{\mp}$	$\pi^{\pm}$	0	± 1	0	2.6×10^{-8}	139.6	$\mu+\nu_\mu$
		π^0	$\overline{\pi^0}$	0	0	0	8.3×10^{-17}	135.0	$\gamma+\gamma$
	ايتا	η	η	0	0	0	7.7×10^{-19}	548.8	$\gamma+\gamma$
		η'	η'	0	0	0	2.4×10^{-21}	957.6	$\eta+\pi+\pi$
العائلة اللبتونية									
	ميون	μ^-	μ^+	0	− 1	$\frac{1}{2}$	2.2×10^{-6}	105.7	$e^- + \bar{\nu}_e + \nu_\mu$
	الكترون	e^-	e^+	0	− 1	$\frac{1}{2}$	∞	0.511	مستقر
μ	نترنيو	ν_μ	$\overline{\nu_\mu}$	0	0	$\frac{1}{2}$	∞	0	مستقر
e	نترنيو	ν_e	$\overline{\nu_e}$	0	0	$\frac{1}{2}$	∞	0	مستقر
	الفوتون	γ	γ	0	0	1	∞	0	

المصطلحـات

— A —

Adjoint operator	مؤثر مرافق
Angular momentum	اندفاع زاوي
Annihilation operator	مؤثر الافناء
Antisymmetric	تناظر عكسي (مضاد)
Approximation	تقريـب
Associative	تجميعي
Asymptotic	مقارب
Average value	قيمة وسطى
Axial vector	متجهة محورية
Azimuthal angle	زاوية سمتية

— B —

Bilinear	ثنائي الخطيـة
Bound state	حالة مرتبطة

— C —

Cononical transformation	تحويل قانوني
Centre of mass	مركز الكتلة
Centrel field	حقـل مركزي
Cenrifugal force	قـوة نابـذة
Character	مميـز
Classical	كلاسيكي
Class	صف

Closed set	مجموعة مغلقـة
Closure relation	علاقـة الاغـلاق
Collision	تصـادم
Comute	يتبـادل
Complete	تـام
Complex	عقـدي
Composition	تركيب
Continuous eigen values	قيم ذاتية مستمرة
Continuous spectrum	طيف مستمر

— D —

Degeneracy	انطباق
Degrees of freedom	درجات الحرية
Density of state	كثافة الحالات
Diagenal	قطـري
Differential cross section	المقطع الفعال التفاضلي
Dirac notations	رموز ديراك
Distribution function	تابع التوزيع

— E —

Eigen function	تابع ذاتي
Eigen value	قيمة ذاتية
Electromagnetic field	حقل كهرطيسي
Electron spin	سبن الالكترون
Energy dencity	كثافةالطاقة
Energy flux	تدفق الطاقـة

Energy states	حالات الطاقــة
Equivalence	تكافؤ
Even function	تابع زوجي
Excitation	إثــارة
Exclusion principle	مبدأ الاستبعاد
Expectation value	قيمة متوقعة

— F —

Fine structure	بنية دقيقة
Forbidden transitions	انتقالات محظورة
Free particle	جسيم حر

— G —

Group	زمرة
Green function	تابع غرين
Ground state	الحالة الاساسية

— H —

Hamiltonian operator	مؤثر هاميلتون
Heisenberg picture	صورة هايزنبرغ
Hermite polynomials	كثيرات حدود هيرميت
Hermition operator	مؤثر هرميتي
Hilbert space	فراغ هيلبرت
Hyperfine structure	البنية الناعمة (فائقة الدقة)

— I —

Ideal gas	غاز مثالي (كامل)

Imaginary matrix	مصفوفة تخيلية
Infinitesimal generator	مولد لامتناه في الصغر
Ingoing wave	موجة قادمة
Inner product	جداء داخلي
Interaction	تفاعل
Internal energy	طاقة داخلية
Invariatn	صامد
Invariance	صمود

— K —

Kinetic energy	طاقة حركية
Kronecker delta	دلتا كرونيكر

— L —

Laboratory system	جملة المختبر
Laguerre polynomials	كثيرات حدود لاغير
Legendre polynomials	كثيرات حدود ليجندر
Linear transformation	تحويل خطي
Linear operator	مؤثر خطي
Localized	متوضع
Lorentz equation	معادلة لورنتز

— M —

Magnetic dipole	ذو القطبين المغناطيسي
Magnetic moment	عزم مغناطيسي
Magnetic resonance	تجاوب مغناطيسي
Magnetic susceptibility	طواعية مغناطيسية (سماحية

Matrix	مصفوفة
Maximum	قيمة عظمى
Mean value	القيمة الوسطى
Mixed state	حالة مختلطة
Momentum	اندفاع

— N —

Normal operator	مؤثر نظامي
Normalized function	تابع منظم (متنظم)
Normalization	تنظيم ـ استنظام
Null matrix	مصفوفة تافهة

— O —

Observable	قابل للمشاهدة (للرصد)
Operator	مؤثر
Ordered	مرتب
Orbital angular momentum	اندفاع زاوي مداري
Orthogonal	متعامد
Orthonormal	متعامد منظم
Outward particle flux	تدفق الجسيمات نحو الخارج
Orbit	مدار
Optical	ضوئي
Order of a grop	رتبة الزمرة

— P —

Para - hydrogen	بارا ـ هدروجين
Parity	زوجية

Partial waves	امواج جزئية
Permutation	تبديل
Period	دور
Permeability	نفوذية
Permittivity	سماحية
Pertubation theory	نظرية الاضطراب
Phase shift	الانزياح الطوري
Plane wave	موجة مستوية
Precession	ترنح
Probability	احتمال
Projection operator	مؤثر اسقاط
Propagation vector	شعاع الانتشار
Pure state	حالة صرفة

— Q —

Quantum Mechanics	ميكانيك الكم
Quantum numbers	اعداد كمومية
Quantization	تكميم

— R —

Recursim relation	علاقة تدرجية
Reduced mass	كتلة مختزلة
Reflection	انعكاس
Relative coordinates	احداثيات نسبية
Relative momenta	اندفاعات نسبية
Relativistic quantum Mechanics	ميكانيك الكم النسبوي

Representation	تمثيل
Resonance	تجاوب

— S —

Scalar product	جداء سلمي
Scattering	تبعثر
Scatterer	مبعثر
Selection rules	قواعد الانتقاء (الاصطفاء)
Spherical wafes	امواج كروية
Spectral theory	النظرية الطيفية
Splitting of spectal lines	انقسام الخطوط الطيفية
Symmetry	تناظر

— T —

Total	كلي
Trace	اثر
Transformation	تحويل
Transpose	منقول

— U — V — W

Uncertainty relation	علاقة الشك (الارتياب)
Uniform	متجانس
Unitary	واحدي
Variational methods	طرائق التغييرات
Wave paket	سحابة موجية (حزمة امواج)
Wave - particle duality	الازدواجية ــ موجة ــ جسيم

ـ المراجع الأساسية ـ

1 — Quantum Mechanics A.S. Davydov 1976

2 — Quantum Mechanics L. I. Schiff 1968

3 — Quantum theory D. Bohm 1954

4 — Quantum Mechanics A. Messiah 1974

5 — Quantum Mechanics L.D. London & Lifshits 1965

6 — Advanced Engineering Mathematics C. R. Wylie JR. 1966

7 — Methods of theoretical physics Mors and Feshback 1943

8 — Principles of quantum Mechanics P. Dirac 1956

9 — Advanced quantum theory M. Scadron 1979

10— Classical Groups of physics B. Wgbourne 1974

11— Quantum Mechanics Arno Bohm 1986

ـ الفهـرس ـ

	الصفحة
١ ـ مقدمة	٣
الفصل الأول ـ نظرية التمثيل	٥
١ ـ التمثيلات المختلفة لشعاع الحالة	٧
٢ ـ التمثيلات المختلفة للمؤثرات	١٥
٣ ـ تمثيل شرودينغر	٢٢
٤ ـ تمثيل هايزنبرغ	٢٣
٥ ـ تمثيل التفاعل	٢٥
٦ ـ المعادلة الكلاسيكية للحركة	٢٦
٧ ـ حركة جسيم مشحون ضمن حقل كهرطيسي	٢٨
٨ ـ الانتقال الحدي من ميكانيك الكم الى الميكانيك الكلاسيكي	٣٢
٩ ـ التقريب شبه الكلاسيكي (WKB)	٣٤
١٠ ـ تطبيق طريقة التغيرات في الحسابات التقريبية	٣٨
الفصل الثاني ـ النظرية النسبوية الكمومية لحركة جسيم ضمن حقل خارجي	٤٣
١ ـ الجسيمات الأولية في الميكانيك الكومي	٤٥
٢ ـ المعادلة النسبوية لجسيم معدوم السبن	٤٨
٣ ـ الجسيمات الحرة ذات السبن المعدوم	٥٣
٤ ـ التفاعل بين الجسيم عديم السبن والحقول الكهرطيسية	٥٩
٥ ـ مسائل	٦٦
الفصل الثالث ـ النظرية الكمومية للجمل المؤلفة من جسيمات متماثلة	٦٧
١ ـ معادلة شرودينغر لجملة مؤلفة من جسيمات متماثلة	٦٩
٢ ـ التوابع الموجبة المتناظرة وذات التناظر المضاد	٧٣
٣ ـ النظرية الابتدائية للحالة الأساسية لذرة ذات الكترونين	٨٠
٤ ـ الحالات المثارة لذرة الهليوم (اورثو ـ بارا)	٨٨
٥ ـ مسائل	٩٢

	الصفحة
الفصل الرابع ـ التكميم الثاني لجمل البوزونات والفيرميونات	٩٣
١ ـ التكميم الثاني للحقل الكهرطيسي في غياب الشحنات الكهربائية	٩٥
٢ ـ التكميم الثاني لحقل الميزونات	١٠٢
٣ ـ التكميم الثاني لجمل من الفيرميونات غير المتفاعلة	
الفصل الخامس ـ نظرية الانتقالات الكمومية	١١٥
١ ـ نظرية الاضطراب التابع للزمن	١١٧
٢ ـ اثارة الذرة بقذفها بجسيم ثقيل	١٢١
٣ ـ الكظم والفتح المفاجيء والاغلاق المفاجيء للتفاعل	١٢٥
٤ ـ احتمال الانتقال خلال واحدة الزمن	١٣٠
٥ ـ التفاعل بين الجمل الكمومية والاشعة الكهرطيسية	١٣٢
٦ ـ مسائل	١٤٠
الفصل السادس ـ نظرية التبعثر	١٤١
١ ـ مقدمة	١٤٣
٢ ـ النظرية الكلاسيكية للتبعثر	١٤٣
٣ ـ تعريف المقطع الفعال	١٤٤
٤ ـ توزع المسارات الحرة	١٤٥
٥ ـ المقطع الفعال كتابع لزاوية التبعثر	١٤٦
٦ ـ المقطع الفعال التفاضلي	١٤٧
٧ ـ النظرية العامة للتبعثر	١٤٩
٨ ـ تقريب الانحرافات الصغيرة (نظرية الاضطراب الكلاسيكية)	١٥١
٩ ـ المقطع الفعال في حالة انتقال الطاقة والاندفاع	١٥٦
١٠ ـ الحل الدقيق لمسألة التبعثر	١٥٨
١١ ـ استخدام المقاطع الفعالة في التحري عن قانون القوة	١٦١
١٢ ـ التحويل من جملة مركز الكتلة الى جملة المختبر	١٦١

الصفحة

١٣ ـ مناقشة النتائج	١٦٤
الفصل السابع ـ النظرية الكمومية للتبعثر	**١٦٧**
١ ـ التبعثر المرن لجسيمات معدومة السبن	١٦٩
٢ ـ نظرية التبعثر المرن وفق تقريب بورن	١٧٩
٣ ـ طريقة الأمواج الجزئية	١٨٤
٤ ـ التبعثر المرن للجسيمات البطيئة	١٩٢
الفصل الثامن ـ الطرائق التقريبية في دراسة البنية الذرية	**١٩٣**
١ ـ طريقة الحقل المركزي	١٩٥
٢ ـ دورية العناصر	١٩٧
٣ ـ نموذج توماس ـ فيرمي	١٩٨
٤ ـ حساب الكمون	٢٠٠
٥ ـ حقول هارتري المنسجمة	٢٠٢
٦ ـ تصحيح تقريب الحقل المركزي	٢٠٤
٧ ـ مسائل	٢٠٥
الفصل التاسع ـ النظرية الكمومية للجزيئات	**٢٠٩**
١ ـ نظرية التقريب الكظوم	٢١١
٢ ـ جزيء الهدروجين	٢١٤
٣ ـ كمون مورس	٢٢١
٤ ـ دوران واهتزاز الجزيئات ثنائية الذرة	٢٢٣
٥ ـ سويات الطاقـة	٢٢٤
٦ ـ تأثير التماثل بين النواتين	٢٢٦
٧ ـ مسائل	٢٢٧
ملحق الجسيمات الأولية	**٢٢٨**
المصطلحات العلمية	**٢٣٠**
المراجـع	**٢٣٧**
الفهـرس	**٢٣٨**